

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

**MÉMOIRE PRÉSENTÉ À
L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À TROIS-RIVIÈRES**

**COMME EXIGENCE PARTIELLE
DE LA MAÎTRISE EN SCIENCES DE L'ÉNERGIE ET DES MATÉRIAUX
OFFERTE EN EXTENSION PAR L'INSTITUT NATIONAL DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**PAR
MARC LEFEBVRE**

**SIMULATION NUMÉRIQUE D'UN MOTEUR À COMBUSTION
INTERNE FONCTIONNANT À L'HYDROGÈNE ET TESTS EXPÉRIMENTAUX**

OCTOBRE 2007

Université du Québec à Trois-Rivières

Service de la bibliothèque

Avertissement

L'auteur de ce mémoire ou de cette thèse a autorisé l'Université du Québec à Trois-Rivières à diffuser, à des fins non lucratives, une copie de son mémoire ou de sa thèse.

Cette diffusion n'entraîne pas une renonciation de la part de l'auteur à ses droits de propriété intellectuelle, incluant le droit d'auteur, sur ce mémoire ou cette thèse. Notamment, la reproduction ou la publication de la totalité ou d'une partie importante de ce mémoire ou de cette thèse requiert son autorisation.

Résumé

Le présent ouvrage présente des essais sur dynamomètre effectués sur un moteur à combustion interne fonctionnant à l'hydrogène. Les essais ont été effectués sur deux configurations du même moteur. Dans un premier temps, des essais sont réalisés sur le moteur dans son état d'origine muni d'un système d'injection adapté pour l'hydrogène. Ensuite, des essais sont effectués sur le même moteur ayant subi quelques modifications en ce qui concerne le système d'admission et d'injection. Les modifications permettent de laisser entrer l'air avant l'hydrogène, ceci, dans le but de refroidir davantage la chambre de combustion. L'hydrogène n'est pas injecté directement dans l'écoulement d'air, le carburant est plutôt injecté de façon indépendante. Une soupape d'admission est dédiée à l'admission de l'air tandis que l'autre est réservée pour l'injection de l'hydrogène. De cette façon, nous pensons pouvoir réduire les problèmes de pré allumage. Cet ouvrage présente aussi toutes les étapes utilisées dans l'élaboration d'un logiciel permettant la simulation d'un moteur à combustion interne fonctionnant à l'hydrogène. Celui-ci simule le fonctionnement d'un moteur à quatre temps. La phase d'échappement n'est pas simulée étant donné sa complexité.

Une revue de littérature concernant les simulateurs numériques sera présentée et le choix du modèle utilisé sera justifié. La simulation de l'admission sera présentée avec l'ensemble des hypothèses retenues. Des résultats concernant uniquement la simulation de l'admission seront par la suite présentés. Pour compléter la simulation numérique, la modélisation de la combustion et de l'évolution des espèces chimiques seront abordées. Une présentation des résultats expérimentaux et théoriques suivra. Les performances des moteurs ainsi que les émissions polluantes seront analysées afin de vérifier si les modifications apportées au moteur ont permis d'en améliorer le fonctionnement. Pour valider le logiciel, les résultats des essais seront comparés avec les résultats théoriques. À la suite des observations découlant des essais sur le dynamomètre, des recommandations seront émises afin d'améliorer le fonctionnement des moteurs à hydrogène.

Étudiant

Directeur de recherche

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier la fondation de l'UQTR et Hydro-Québec pour les bourses d'études supérieures mises à la disposition des étudiants. Je tiens également à remercier mon directeur de maîtrise, Monsieur Yves Dubé pour son aide et son soutien. Merci aussi à Pierre Benard, Raymond Courteau, Alexandre Palardy et Daniel Normandin pour support divers. Merci aussi à Étienne Dauphinais Rivard et Jasmin Dufour pour toutes ces discussions sur l'hydrogène.

Table des matières

Résumé.....	ii
Remerciements.....	iii
Table des matières.....	iv
Liste des figures.....	vi
Liste des tableaux.....	vii
Liste des appendices.....	vii
Liste des symboles.....	vii
1 INTRODUCTION.....	1
2 L'HYDROGÈNE DANS LE MOTEUR À PISTONS	2
2.1 Problématiques de l'hydrogène.....	2
2.2 Les solutions	2
2.2.1 Injection d'eau.....	2
2.2.2 Injection directe.....	3
2.2.3 Admission séparée.....	3
2.2.4 Les moteurs de types rotatifs.....	4
2.3 La solution retenue par l'IRH.....	5
3 REVUE DE LITTÉRATURE.....	7
3.1 Introduction.....	7
3.2 Expérimentation sur les moteurs à hydrogène	7
3.3 Les simulateurs numériques.....	8
3.4 La méthode numérique utilisée	9
4 MODÉLISATION DE L'ADMISSION.....	10
4.1 Système d'équations de la tuyère.....	10
4.1.1 Calcul de la variation de température.....	12
4.1.2 Calcul de la variation du nombre de Mach.....	12
4.1.3 Calcul de la variation de pression.....	13
4.1.4 Calcul de la friction	13
4.2 Système d'équations du cylindre.....	14
4.2.1 Calcul de la variation de densité.....	14
4.2.2 Calcul de la variation de température.....	15
4.2.3 Calcul de la variation de pression.....	15
4.2.4 Calcul de la variation de la quantité de chaleur.....	15
4.3 Approche utilisée pour la modélisation de l'admission	16
4.4 Hypothèses et simplifications.....	19

4.5	Résultats des simulations pour la partie admission	20
4.5.1	Effet du maillage	20
4.5.2	Effet de la friction.....	21
4.5.3	Effet du coefficient de décharge	23
4.5.4	Évolution des conditions dans la tubulure	23
4.5.5	Évolution des conditions dans le cylindre	24
4.5.6	Effet de l'injection d'hydrogène sur la masse d'air entrant dans le cylindre.....	26
5	MODÉLISATION DE LA COMBUSTION	28
5.1	Système d'équations pour la combustion.....	28
5.2	Équilibre chimique	33
5.2.1	Présentation des équations utilisées.....	34
5.2.2	Calcul des valeurs de départ	35
5.2.3	Fraction molaire du mélange pauvre	36
5.2.4	Fraction molaire du mélange riche	36
5.3	Calcul de la vitesse de flamme.....	37
5.4	Approche utilisée pour la modélisation de la combustion.....	38
6	RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX ET COMPARAISON AVEC LA SIMULATION	42
6.1	Introduction.....	42
6.2	Dispositifs expérimentaux.....	42
6.2.1	Déroulement des tests.....	43
6.3	Résultats numériques	43
6.3.1	Résultats généraux.....	44
6.3.2	Effet de l'injection d'eau	47
6.3.3	Effet de l'avance à l'allumage	47
6.3.4	Effet de l'ajout d'un turbo	49
6.4	Validation du modèle	50
6.5	Comparaison des résultats expérimentaux	52
6.5.1	Présentation des résultats expérimentaux	52
6.5.2	Injection d'eau	56
7	CONCLUSION	58
8	TRAVAUX FUTURS ET PERSPECTIVES.....	59
9	LISTE DES RÉFÉRENCES	61

Liste des figures

Figure 2-1 : Schéma de l'admission séparé (www.Howstuffworks.com)	4
Figure 2-2 : Photo du moteur Wankel (www.envenenado.com)	5
Figure 2-3 : Photo de l'arbre à cames et du port d'admission	5
Figure 2-4 : Photo du canal de dérivation	6
Figure 4-1 : Volume de control pour l'admission	10
Figure 4-2 : Volume de control du cylindre	14
Figure 4-3 : Ordinogramme du calcul de l'admission	17
Figure 4-4 : Courbes de références de la pression et du débit	18
Figure 4-5 : Effet du maillage sur la pression à la soupape	20
Figure 4-6 : Effet du maillage sur les débits à la soupape	21
Figure 4-7 : Influence de la friction pour une levée faible	22
Figure 4-8 : Influence de la friction pour une levée grande	22
Figure 4-9 : Influence du coefficient C_d	23
Figure 4-10 : Évolution du nombre de Mach dans la tuyère	24
Figure 4-11 : Évolution de T et P dans la tuyère	24
Figure 4-12 : Évolution de la pression dans le cylindre	25
Figure 4-13 : Effet de l'ajout d'hydrogène sur la pression	25
Figure 4-14 : Effet de l'ajout d'hydrogène sur la température	26
Figure 4-15 : Effet de l'ajout d'hydrogène sur la masse d'air frais	26
Figure 5-1 : Ordinogramme du module principal de combustion	38
Figure 5-2 : Ordinogramme du module de calcul de la température adiabatique de flamme	39
Figure 5-3 : Ordinogramme du module ECP.bas	40
Figure 6-1 : Résultats global des simulations	46
Figure 6-2 : Effet de l'injection d'eau sur les émissions de NOx	47
Figure 6-3 : Effet de l'avance à l'allumage	48
Figure 6-4 : Effet de l'ajout d'un compresseur	50
Figure 6-5 : Validation de rendement volumétrique	51
Figure 6-6 : Validation des performances	51
Figure 6-7 : Phi maximum du moteur modifié	52
Figure 6-8 : Comparaison de l'écoulement	53
Figure 6-9 : Puissance vs rpm	54
Figure 6-10 : Couple vs rpm	54
Figure 6-11 : Émissions polluantes	55
Figure 6-12 : Schéma de l'injection d'hydrogène et admission d'air	55
Figure A-1 : L'interface principale	61

Figure A-2 : Fenêtre des performances	62
Figure A-3 : Arbre du programme	63
Figure B-1 : Schéma de la tubulure.....	64
Figure B-2 : La géométrie réelle de la tubulure d'admission	64
Figure B-3 : La soupape	65
Figure C-1 : Facteurs influençant le rendement volumétrique	68
Figure C-2 : Effet du transfert de chaleur sur le rendement volumétrique	68
Figure C-3 : Section effective de la soupape	69
Figure C-4 : Coefficient C_d	70
Figure C-5 : Effet des différents coefficients de décharge	71

Liste des tableaux

Tableau 1 : Calcul des valeurs de départ des espèces chimiques.....	33
Tableau B-1 : Les dimensions de la tubulure d'admission.....	67
Tableau B-2 : Mesures de la levée de la soupape d'admission	68
Tableau B-3 : Données concernant le moteur et les soupapes.....	69

Liste des appendices

Appendice A : Le simulateur	62
Appendice B : Dimensions de l'admission.....	65
Appendice C : Discussion sur le rendement volumétrique	68
Appendice D : Calcul divers	73
Appendice E : Calcul des fractions molaires.....	75
Appendice F : Calcul des dérivées partielles	79
Appendice G : Calcul des NOx	84

Liste des symboles

SYMBOLES

A	Surface
ABDC	After bottom dead center (après le point mort bas)
ATDC	After top dead center (après le point mort haut)
BBDC	Before bottom dead center (avant le point mort bas)
BTDC	Before top dead center (avant le point mort haut)

c	Vitesse du son
c_p	Chaleur spécifique (pression constante)
c_v	Chaleur spécifique (volume constant)
C	Coefficient de perte massique de Ferguson
D	Diamètre
E	Énergie totale dans le système
F	Force
g	Accélération gravitationnelle
h	Enthalpie spécifique
h	Coefficient de transfert de chaleur
H	Enthalpie totale
m	Masse
\bullet	
\dot{m}	Débit massique
M	Nombre de Mach
P	Pression
Q	Quantité de chaleur
R	Constante des gaz parfaits
s	Entropie
T	Température
u	Énergie interne spécifique
U	Énergie interne totale
V	Vitesse
v	Volume spécifique
V	Volume
w	Vitesse angulaire
W	Travail
x	Fraction massique brûlée
Z	Hauteur

INDICES

b	Burned (brûlé)
ℓ	Perdue (lost)
s	Surface
T	Stagnation
u	Unburned (non brûlé)
v	Soupape
w	Wall (paroi)
f	Friction

SYMBOLES GRECS

ρ	Densité
f	Coefficient de friction
τ	Contrainte cisaillement
γ	Gamma
μ	Viscosité de l'air

1 INTRODUCTION

Depuis déjà quelque temps, la baisse constante des réserves de pétrole nous oblige à chercher de nouveaux carburants qui le remplaceront. L'hydrogène semble de plus en plus être le carburant du futur. Pour se préparer à son arrivée, les technologies actuelles doivent être adaptées afin d'être compatibles à ce carburant. Malgré la venue des piles à combustibles et des moteurs électriques, le moteur à combustion interne restera une solution très intéressante pour fournir la puissance aux voitures et autres installations stationnaires. En effet, ce dernier a fait ses preuves et demeure une solution fiable, sans compter que les nouvelles technologies permettront d'améliorer davantage l'efficacité du moteur. Parmi ces dernières, on compte l'injection directe et la photo-détonation, dont le développement est présentement en cours. Dans un avenir proche, le moteur à piston devra donc pouvoir fonctionner avec l'hydrogène.

La conversion des moteurs conventionnels vers l'hydrogène présente certains problèmes présentés dans le deuxième chapitre. L'Institut de recherche sur l'hydrogène a apporté certaines modifications à un moteur afin d'en améliorer le fonctionnement. Le présent projet de maîtrise consiste donc à réaliser les tests sur banc d'essai du moteur modifié. Les essais ont comme principaux buts : la vérification du comportement du moteur face au retour de flamme, la mesure des performances du moteur (puissance et couple) ainsi que la mesure des émissions de NOx. Les essais permettront donc la validation expérimentale de la solution retenue par l'IRH afin d'améliorer le comportement d'un moteur à l'hydrogène. Aucun test n'a été réalisé sur le moteur avant les modifications.

Un logiciel de simulation numérique a été développé afin de prédire les performances du moteur modifié. Ce logiciel a été développé dans le but de se doter d'un outil de simulation flexible et facilement modifiable. Le logiciel a aussi été développé dans un but académique. Ce dernier permet de tenir compte des modifications apportées au moteur et permettra donc de vérifier leurs impacts sur le comportement de ce dernier. Le simulateur permet le calcul de plusieurs variables, principalement, la puissance, l'efficacité et les émissions d'oxydes d'azote. L'absence de logiciel pour la modélisation de l'évolution des espèces chimiques nous a forcés à concevoir notre propre routine de calcul. Étant donné le manque d'instrument pour l'acquisition de certaines données, seules la puissance et les NOx pourront être utilisées pour comparer le modèle numérique avec les tests sur banc d'essai. Le logiciel a été construit pour contrôler et visualiser chaque variable, ce qui est un net avantage par rapport au logiciel industriel. Après observation des problèmes liés aux émissions des NOx, un système d'injection d'eau a été conçu afin de vérifier son impact sur la diminution des polluants.

2 L'HYDROGÈNE DANS LE MOTEUR À PISTONS

Ce chapitre présente la problématique reliée à l'utilisation de l'hydrogène dans le moteur à piston ainsi que les solutions envisagées. Le prototype de l'IRH y est aussi présenté. On présente de plus les prototypes du moteur à hydrogène de certains manufacturiers dans les références 1 à 6.

2.1 Problématiques de l'hydrogène

Le problème majeur occasionné par l'utilisation de l'hydrogène dans le moteur à combustion interne est celui des retours de flamme. En effet, la plupart des prototypes à l'hydrogène ont un grave problème de retour de flamme vers le système d'admission. On appelle « backflash » ce type de phénomène, mais on utilise à tort le terme « backfire », qui représente une explosion dans le système d'échappement. Le mélange air-H₂ est enflammé avant ou pendant qu'il pénètre dans le cylindre et le retour de flamme de l'explosion se rend jusqu'au filtre à air. Ce phénomène se produit bien sûr dans les moteurs munis d'un système à injection indirecte centrale ou multipoint. L'utilisation du carburateur provoquerait bien sûr le même phénomène. C'est la présence de points chauds qui causent ce problème. Plusieurs recherches ont été réalisées sur l'utilisation de l'hydrogène dans le cycle Otto [41,42]. Il existe plusieurs solutions pour contrer les retours de flamme, en voici quelques-unes avec leurs avantages et inconvénients.

2.2 Les solutions

Pour contrer le phénomène des retours de flamme, il existe plusieurs solutions. Comme nous le verrons dans les paragraphes qui suivent, chacune de ces solutions affecte les émissions polluantes de NO_x.

2.2.1 Injection d'eau

Une méthode permettant de réduire la température à l'intérieur du cylindre est l'injection d'eau [36]. L'eau peut être admise par le biais d'un carburateur ou d'un système d'injection conventionnel. Elle doit être admise sous forme de fine gouttelette et non pas en vapeur. Lorsque le mélange est allumé, les fines gouttelettes font partie intégrante de la réaction chimique et provoquent une multitude de phénomènes tels que le changement de phase liquide à vapeur et l'absorption de chaleur. Le dispositif de recirculation des gaz d'échappement (EGR) a sensiblement le même effet puisque le principal produit de combustion de l'hydrogène dans l'air est l'eau. Voici une brève explication du phénomène. Dans une première étape, le mélange dans la chambre de combustion s'enflamme et commence à se propager. Sur le front de propagation de la flamme, la portion du mélange qui n'a pas encore brûlée se retrouve mêlée aux gouttelettes d'eau. Lorsque la flamme les rencontre, elle les transforme instantanément en vapeur. Ce changement de phase de l'eau provoque une grande expansion. Une grande quantité d'énergie est donc

consommée par ce changement de phase, en conséquence, la température maximale de combustion sera diminuée. Les points chauds sont refroidis et la probabilité d'autoallumage diminué.

- **Avantages** : L'injection d'eau permet de diminuer considérablement les émissions de NO_x . Il faut savoir que les NO_x sont formés lorsque l'azote et l'oxygène de l'air sont chauffés à de très hautes températures. Donc, si en injectant de l'eau, on peut maintenir la température maximale en dessous de la température de formation des NO_x , on diminue énormément le niveau de pollution. Des résultats concernant l'injection d'eau sont présentés à la section 6.5.2.
- **Inconvénients** : Un des principaux problèmes est l'introduction de l'eau de façon efficace. Avec la technologie actuelle des systèmes à injection, ce n'est qu'une simple formalité. Cependant, il faut éviter que l'eau se mélange à l'huile dans la chambre à combustion. Il faut donc apporter un soin particulier aux mécanismes d'étanchéités. La corrosion peut aussi devenir un problème selon Prior et al. [36].

2.2.2 Injection directe

L'injection directe est sans aucun doute la solution la plus avancée technologiquement. Elle permet d'injecter l'hydrogène à la toute dernière fraction de seconde. On se rapproche donc du principe du moteur diesel. Puisque l'on injecte le carburant en fin de compression, la totalité de l'air aura eu plus de temps pour refroidir les points chauds. Il est possible que les points chauds ne soient pas suffisamment refroidis pour empêcher le préallumage. En effet, même si le problème de retour de flamme dans le système d'admission est complètement réglé, il y a toujours risque de préallumage dans la chambre de combustion.

- **Avantages** : Élimination des retours de flamme. Permet une augmentation de la puissance étant donné que durant l'admission, on ne remplace pas une certaine quantité d'air par de l'hydrogène. Dans un mélange stoechiométrique, l'hydrogène occupe 30 % du volume, c'est donc dire que 30 % de l'air sera remplacé par le carburant [17].
- **Inconvénients** : Nécessite un injecteur pouvant fournir des débits très élevés vus la très courte durée d'injection. Le problème étant la faible densité de l'hydrogène sous sa forme gazeuse. La formation d'un mélange homogène est beaucoup plus complexe que dans le cas de l'injection indirecte. Si le mélange n'est pas suffisamment homogène, les émissions de NO_x en seront affectées [25]. Les injecteurs seront aussi soumis aux pressions et températures extrêmes de la phase de combustion.

2.2.3 Admission séparée

Une autre façon de contrer le problème est l'admission séparée. C'est-à-dire qu'on admet l'air et l'hydrogène de façon séparée. Ce système nécessite donc deux soupapes d'admissions comme dans la figure 2-1.

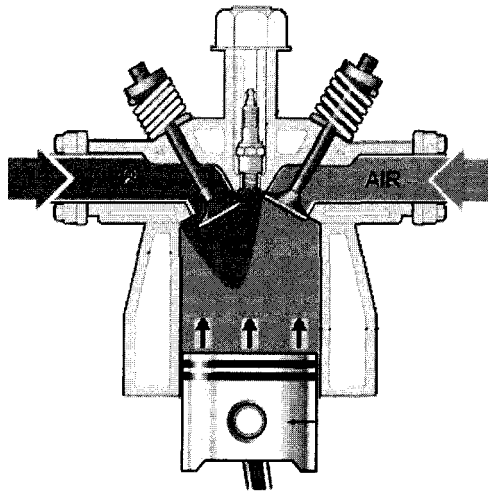


Figure 2-1 : Schéma de l'admission séparé (www.Howstuffworks.com)

On peut comparer cette solution à l'injection tardive, qui consiste à injecter le carburant le plus tard possible, permettant ainsi à l'air de refroidir davantage les points chauds. Dans le cas de l'admission séparée, une des deux soupapes s'ouvre dans un premier temps pour laisser entrer l'air. Ceci permet à l'air de refroidir les points chauds et de diluer les gaz résiduels chauds du cycle précédent. Ensuite, la deuxième soupape s'ouvre pour laisser entrer l'hydrogène sous haute pression, idéalement, en fin d'admission lorsque le piston est au point mort bas et que la soupape d'admission d'air est presque fermée. Ceci permet de maximiser la quantité d'air dans le cylindre.

- **Avantages :** La pression délivrée par l'injecteur d'hydrogène est plus faible que celle requise dans un système à injection directe. Cette solution a le potentiel d'augmenter la puissance du moteur, pour les mêmes raisons que l'injection directe.
- **Inconvénients :** Il subsiste toujours un risque d'auto-allumage qui est bien sûr supérieur à celui observé avec l'injection directe. Le risque de retour de flamme n'est pas complètement éliminé puisque l'injection peut aussi se faire lorsque la soupape d'admission d'air est encore ouverte. Il faut séparer le système d'admission en deux. Modifier l'arbre à cames pour que les deux soupapes ne s'ouvrent pas en même temps. Pour un moteur fabriqué en série, on comprend donc qu'il ne s'agit pas d'un inconvénient, mais d'une simple modification aux dessins de conception. Le rendement volumétrique peut être fortement perturbé étant donné l'élimination d'une soupape pour l'admission de l'air. Il peut donc en résulter une forte diminution des performances. Tout comme l'injection directe, il peut aussi y avoir un problème dans la formation du mélange.

2.2.4 Les moteurs de types rotatifs

Avec tous les avantages et inconvénients vus précédemment, nous pouvons constater que le moteur rotatif est en soi une solution au problème occasionné par l'hydrogène. Que ce soit dans un moteur Wankel ou un

autre concept de moteur rotatif, les quatre phases du cycle se font généralement à des endroits différents. On peut voir sur la figure 2-2, le moteur rotatif Wankel.

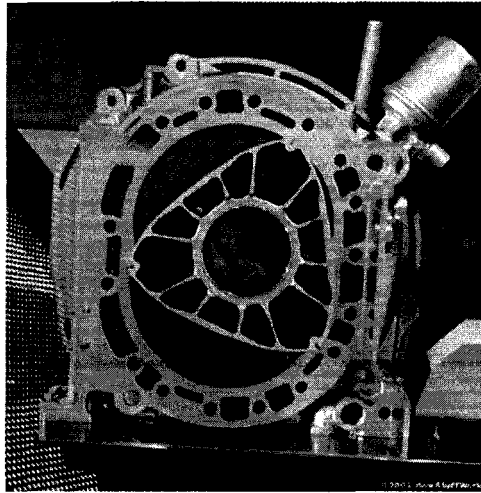


Figure 2-2 : Photo du moteur Wankel (www.envenenado.com)

Donc, durant l'admission, il est presque impossible que le phénomène de préallumage survienne, car il n'y a pas de point chaud (bougie et soupape). D'ailleurs, ces moteurs sont souvent dépourvus de soupapes, ce qui constitue un très grand avantage à l'égard de la simplicité mécanique. Les retours de flamme sont donc pratiquement impossibles. Il peut tout de même y avoir préallumage.

2.3 La solution retenue par l'IRH

À l'IRH, un moteur a été modifié pour fonctionner à l'hydrogène durant l'année 2001. Étant donné la difficulté à l'époque de se procurer des injecteurs d'hydrogène pour l'injection directe, la solution adoptée pour tenter de contrer les problèmes de retour de flamme fut celle de l'admission séparée. Le moteur utilisé est un moteur quatre cylindres de deux litres munis de 16 soupapes. Celui-ci est fabriqué par Suzuki et est utilisé dans les Samourai/Sidekick/X-90 et Vitara ainsi que GM Tracker. L'ouverture de la soupape d'air et d'hydrogène est décalée de 70 °. Pour ce faire, un nouvel arbre à cames a été machiné comme on peut le voir sur la figure 2-3.

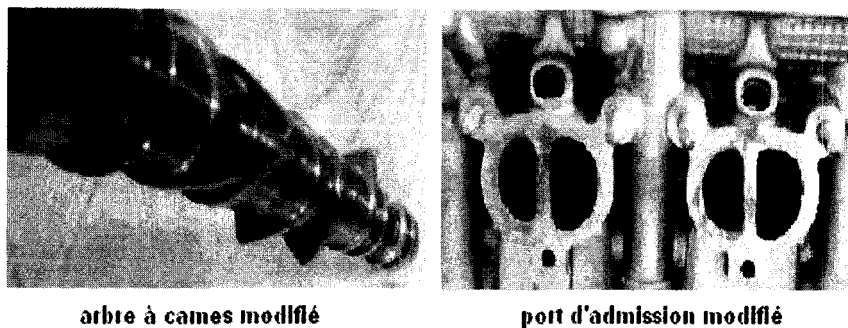


Figure 2-3 : Photo de l'arbre à cames et du port d'admission

Nous avons aussi séparé les conduits d'admission, comme on peut le voir sur la figure 2-3. La fabrication d'un canal de dérivation a aussi été nécessaire pour séparer l'injection d'hydrogène et l'admission de l'air. Cette pièce est présentée à la figure 2-4 :

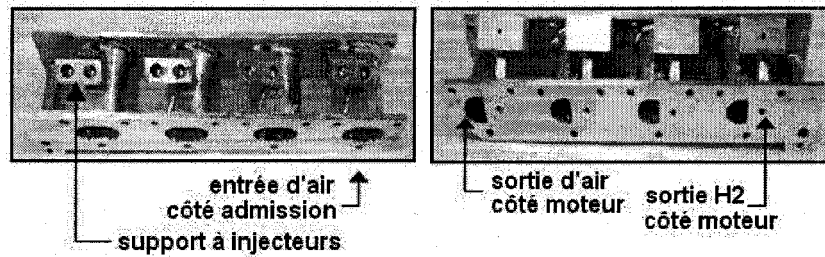


Figure 2-4 : Photo du canal de dérivation

Les injecteurs utilisés sont des Siemens DEKA CNG, et il y en a deux par cylindre. Les modifications apportées au moteur ont été réalisées par Jean-Robert Desmeules dans le cadre d'un stage durant son baccalauréat. La pression d'injection est de 10 bars.

3 REVUE DE LITTÉRATURE

3.1 Introduction

Cette revue de littérature traite des moteurs fonctionnant à l'hydrogène ainsi que de la simulation numérique. D'abord, un bref aperçu des expérimentations sur les moteurs à hydrogène sera présenté et par la suite, une section sera réservée aux simulateurs numériques.

3.2 Expérimentation sur les moteurs à hydrogène

Les expérimentations concernant les moteurs à hydrogène sont très limitées. Les études concernant l'utilisation de l'hydrogène sont surtout concentrées sur l'addition d'hydrogène dans les moteurs conventionnels. Dans ce cas, l'hydrogène n'est pas nécessairement le carburant principal, le gaz est plutôt utilisé pour améliorer l'efficacité des moteurs et permettre l'utilisation de mélange pauvre. Lambe et Watson [51] ont mené des tests sur l'ajout d'hydrogène dans un moteur diesel où 65 à 90 % de l'énergie est fournie par l'hydrogène. L'allumage se fait lors de l'injection d'une faible quantité de diesel. Les auteurs observent une augmentation de l'efficacité de 15 %. Le moteur monocylindre a subi quelques modifications et l'injection d'eau est utilisée pour éliminer les problèmes de préallumage à pleine charge. Une diminution des émissions polluantes est aussi observée. Masood et al. [52] ont aussi réalisé des tests semblables sur un moteur Kirlokar AV-1 monocylindre à taux de compression variable. L'ajout d'hydrogène est réalisé de façon directe et indirecte. Dans les deux cas, une augmentation de l'efficacité est observée, celle-ci étant supérieure pour le cas de l'injection indirecte. Le mélange étant plus homogène, la combustion est plus complète. Une diminution des NOx est aussi observée. Sher et Hacoheh [53] ont pu faire fonctionner un moteur à essence conventionnel avec un mélange air-essence très pauvre grâce à l'ajout d'hydrogène. Pour un mélange air-essence près de la stoechiométrie, une diminution de l'ordre de 10 à 15 % de la consommation spécifique (b.s.f.c) est observée. Pour des mélanges air-essence en dessous de la limite d'inflammabilité, l'ajout d'hydrogène permet une diminution de 20 à 23 % de la consommation spécifique (b.s.f.c). Al-Janabi et Al-Baghdadi [33] arrivent sensiblement aux mêmes conclusions que Sher et Hacoheh. Pour ce qui est des moteurs fonctionnant uniquement à l'hydrogène, Khajuria et Mathur [27] ont fait des tests sur un moteur TD35 Varimax monocylindre. Aucune spécification supplémentaire n'est donnée quant au fonctionnement du moteur. Ce dernier semble fonctionner sans problème pour des valeurs ϕ allant jusqu'à 0.8. Ces résultats sont douteux si l'on se fit aux problèmes de pré allumage rencontrés normalement pour des valeurs de ϕ supérieur à 0.5. Sierens et Verhelst [54] ont utilisé un moteur V8 GM/Crusader avec un taux de compression de 8.5 :1 fonctionnant sans soupape papillon. Seule la quantité d'hydrogène varie pour contrôler la puissance du moteur. Les auteurs observent des problèmes de pré allumage à partir d'une valeur de ϕ de 0.5 (voir section 5.2 pour explication). Ils observent aussi des problèmes de contamination de l'huile par l'hydrogène.

3.3 Les simulateurs numériques

La simulation numérique est devenue un outil indispensable en ingénierie, surtout lorsqu'il s'agit de développer des moteurs à combustion interne. En utilisant les bonnes hypothèses et équations, il est possible de recréer la réalité de façon assez fiable. La modélisation des moteurs à pistons est encore en développement et suit surtout l'évolution de notre compréhension des phénomènes physiques et chimiques se produisant lors de la combustion. L'évolution des ordinateurs est aussi un facteur clé puisque ceux-ci sont de plus en plus rapides et permettent donc la prise en charge de systèmes d'équations de plus en plus complexes. Dans l'industrie automobile, la modélisation numérique permet de sauver à la fois temps et argent. Ce projet permettra d'avoir un contrôle absolu sur l'ensemble des paramètres de la simulation. Nous aurons donc un outil très flexible pour simuler les diverses modifications pouvant être apportées à un moteur conventionnel. Un modèle numérique décrit la thermodynamique, l'écoulement fluide, les transferts de chaleur, la combustion, et la formation des polluants. Il existe deux types de modèles, soit les modèles thermodynamiques et les modèles basés sur la dynamique des fluides, selon si celui-ci est basé sur les équations de conservation d'énergie ou sur une analyse complète de la dynamique des fluides. Pour ce qui est des modèles thermodynamiques, voici les trois modèles existants :

- Zéro dimension;
- Phénoménologique;
- Quasi dimensionnel.

Les modèles utilisant la dynamique des fluides sont souvent appelés modèle multidimensionnel puisqu'ils peuvent donner des informations sur la géométrie de l'écoulement. Ceux-ci sont basés sur la résolution des équations gouvernantes d'écoulement de fluide et tiennent compte de la turbulence. Mentionnons que ces modèles sont brièvement expliqués dans Heywood [9].

La littérature sur la simulation de moteur à hydrogène est très limitée. Fagelson et al. [26] ont utilisé un modèle deux zones quasi-dimensionnel pour calculer la puissance et les émissions de NOx d'un moteur à hydrogène. Ils ont utilisé un modèle de combustion semi-empirique de la forme $u_t = A Re^B u_l$, où A et B sont des constantes, Re est le nombre de Reynolds basé sur le diamètre et la vitesse du piston ainsi que sur les propriétés des gaz brûlés. Ici, u_t et u_l représentent les vitesses de flamme turbulente et laminaire. Un front de flamme sphérique est assumé, les pertes de chaleur sont négligées et la formation des NOx est calculée en utilisant 10 zones de masse constante dans les gaz brûlés couplés au mécanisme de Zeldovich étendu [43]. Le modèle est validé par des mesures où la quantité d'hydrogène et l'avance à l'allumage sont variées. Prabhu-Kumar et al. [14] ont utilisé ce modèle pour prédire les performances d'un moteur équipé d'un compresseur volumétrique. Ils ont remarqué une surévaluation du taux de variation de la pression. Keck [15] a pris des mesures dans un moteur avec accès optique, fonctionnant au propane ou à l'hydrogène et utilisait un modèle à entraînement turbulent pour comparer la théorie à l'expérience. Johnson [7] a utilisé le

code Kiva-3V [50] développé au laboratoire de Los Alamos National avec le modèle standard de tourbillon d'Eddy. Le rendement volumétrique est fixé par l'utilisateur dans ce cas. Le modèle a aussi été validé par des mesures. Fontana et al. [8] ont modifié le code Kiva-3V pour simuler un moteur fonctionnant avec un mélange propane/hydrogène. Les modèles zéro et multidimensionnels ont été utilisés au Czech Technical University. Pour ce qui est du modèle zéro dimension, il est basé sur le GT-Power code [49] et utilise la loi de Wiebe [9] modifiée pour prédire les pertes de chaleur. Les NOx sont calculés en utilisant le mécanisme de Zeldovich étendu. Finalement, Jie et Yongkang [28] ont utilisé un modèle zéro dimension utilisant la loi de Wiebe. On ne donne pas la valeur expérimentale pour valider cette loi, qui est normalement utilisée pour les moteurs à essence. Le modèle est utilisé pour valider l'effet de la variation du taux de compression, de l'avance à l'allumage et déterminer le diamètre optimal du piston. Aucune validation expérimentale n'est réalisée.

Sur le marché, on retrouve peu de logiciels de simulation pour les moteurs à combustion interne. Parmi ceux-ci, nous retrouvons le logiciel Ricardo Wave (www.ricardo.com), KIVA (www.lanl.gov) et le GT Power code [49] qui sont souvent intégrés à des logiciels de simulation comme Fluent. Le « General Motors Research Laboratories » possède un simulateur très performant. Nous pouvons donc penser que les différents manufacturiers automobiles possèdent leur propre simulateur.

3.4 La méthode numérique utilisée

La méthode numérique utilisée pour la résolution des différents systèmes d'équations est la méthode de Runge-Kutta d'ordre 5 [37]. Dans le cas de la modélisation de l'admission, la méthode de Runge-Kutta est utilisée sur des volumes finis [44]. Pour ce qui est de la modélisation de la combustion, la méthode numérique sera appliquée à un système deux zones séparées par un front de flamme infiniment mince. Ce type modèle est appelé modèle zéro dimension. La modélisation des NOx est aussi basée sur le mécanisme de Zeldovich étendu. Le langage de programmation utilisé est Visual Basic. Les résultats numériques sont enregistrés en format Excel et analysés par la suite. Un bref aperçu de l'interface du simulateur est présenté dans l'appendice A. Pour des raisons d'espaces, le code source du programme n'est pas inclus.

4 MODÉLISATION DE L'ADMISSION

Ce chapitre présente les systèmes d'équations utilisés pour la modélisation de l'admission. La modélisation de l'admission permettra de prédire le rendement volumétrique du moteur. Cette partie est donc très importante, car la puissance du moteur dépend de la quantité d'air admise. Aussi, il sera possible de visualiser l'impact de l'injection de l'hydrogène sur les conditions dans le cylindre. Comme mentionné dans l'introduction, il sera possible de constater les avantages des modifications en ce qui concerne l'injection tardive. Deux systèmes d'équations distincts sont nécessaires, soit un système pour la tubulure d'admission et un autre pour le cylindre. Les systèmes d'équations seront d'abord présentés, la méthode de résolution et les hypothèses de travail suivront. Le chapitre se termine par une présentation de différents résultats concernant uniquement la simulation de l'admission. Mentionnons que l'injection d'hydrogène se fait à débit constant et est affectée par la section d'ouverture de la soupape d'admission d'hydrogène.

4.1 Système d'équations de la tuyère

La première étape est la simulation des conditions dans la tuyère représentant la tubulure d'admission. Les équations qui suivent s'appliquent au cas général d'écoulement isentropique avec friction dans un conduit à section variable. Nous présenterons les équations de base qui seront utilisées pour établir le système d'équations qui permettra de calculer dM/dx , dP/dx et dT/dx . La figure 4-1 présente le volume de contrôle sur lequel seront effectués les calculs.

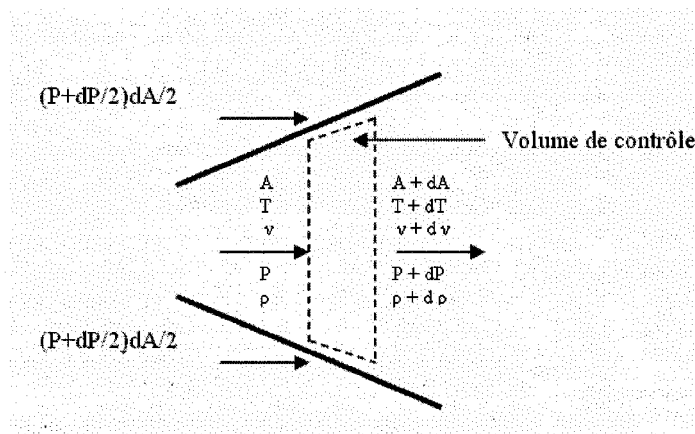


Figure 4-1 : Volume de contrôle pour l'admission

Puisque nous avons besoin de calculer trois variables, soit M , P et T , il faudra donc trois équations. Ces trois équations seront tirées de la conservation de masse, de la conservation de la quantité de mouvement et de la conservation de l'énergie. Les équations des gaz parfaits et du nombre de Mach seront utilisées à des fins de simplifications.

- **Équation de la continuité**

Le bilan de conservation de masse sur un volume de contrôle fini (V) prend la forme suivante selon Alexandrou [11] :

$$\int_{VC} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_{SC} \rho (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA = 0 \quad (4.1)$$

Puisque nous sommes en régime permanent : $\partial \rho / \partial t = 0$. Avec un peu d'analyse, et en éliminant les termes de faible valeur contenant plus d'une dérivée, nous obtenons l'équation 4.2 qui est la forme différentielle de l'équation 4.1 :

$$\frac{d\rho}{\rho} + \frac{dv}{v} + \frac{dA}{A} = 0 \quad (4.2)$$

- **Équation de la conservation de la quantité de mouvement**

Toujours selon Alexandrou [11], la conservation de la quantité de mouvement sur un volume de contrôle fini prend la forme suivante :

$$\int_{VC} \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} dV + \int_{SC} \rho \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA = \sum F_{volume} + \sum F_{surface} \quad (4.3)$$

Encore une fois, puisque nous sommes en régime permanent, nous pouvons éliminer le premier terme. Après quelques manipulations, nous obtenons l'équation 4.4 :

$$\frac{dP}{P} + \frac{2\mathcal{M}^2 dx}{D} + \mathcal{M}^2 \frac{dv}{v} = 0 \quad (4.4)$$

- **Équation de la conservation de l'énergie**

Le bilan de conservation d'énergie sur un volume de contrôle fini prend la forme suivante selon Borgnakke [35] :

$$\frac{dE_{CV}}{dt} = \frac{dQ_{CV}}{dt} - \frac{dW_{CV}}{dt} + \sum \dot{m}_i \left(h_i + \frac{v_i^2}{2} + gZ_i \right) - \sum \dot{m}_e \left(h_e + \frac{v_e^2}{2} + gZ_e \right) \quad (4.5)$$

L'écoulement étant permanent, adiabatique et sans travail, l'équation se réduit à :

$$\sum \dot{m}_i \left(h_i + \frac{v_i^2}{2} + gZ_i \right) = \sum \dot{m}_e \left(h_e + \frac{v_e^2}{2} + gZ_e \right) \quad (4.6)$$

Avec la conservation de la masse, nous pouvons éliminer les termes de débit. Nous pouvons aussi négliger l'énergie potentielle puisqu'elle est faible comparativement aux autres termes. Avec la définition de l'enthalpie h , exprimons l'équation en terme de c_p et T :

$$\left(h_i + \frac{v_i^2}{2} \right) = \left(h_e + \frac{v_e^2}{2} \right) = h_T \quad (4.7)$$

$$c_p T + \frac{v^2}{2} = c_p T_T \quad (4.8)$$

- **Équation supplémentaire**

Avec l'équation 4.9 du nombre de Mach, nous pouvons tirer une équation qui sera très utile plus tard.

$$M = \frac{v}{c} \quad (4.9)$$

$$\frac{dv}{v} = \frac{1}{2} \frac{dT}{T} + \frac{dM}{M} \quad (4.10)$$

L'équation des gaz parfaits nous permet d'obtenir une seconde équation qui sera utilisée pour former le système global de la tuyère. L'équation 4.11 est la formulation différentielle de l'équation des gaz parfaits.

$$\frac{dP}{P} = \frac{d\rho}{\rho} + \frac{dT}{T} \quad (4.11)$$

4.1.1 Calcul de la variation de température

En prenant l'équation 4.8 et en utilisant la définition de la chaleur spécifique $c_p = \gamma R / (\gamma - 1)$ et du nombre de Mach, nous pouvons trouver une formule exprimant T en fonction de la température de stagnation T_o et de M.

$$T = \frac{T_o}{\left(1 + \frac{(\gamma-1)}{2} M^2\right)} \quad (4.12)$$

Avec quelques manipulations, nous obtenons l'équation 4.13 provenant de Alexandrou [11]. Il est important de noter que cette équation est uniquement valide pour un écoulement sans échange de chaleur.

$$\frac{dT}{dx} = - \frac{(\gamma-1)M^2}{1 + \frac{(\gamma-1)}{2} M^2} \frac{T}{M} \frac{dM}{dx} \quad (4.13)$$

4.1.2 Calcul de la variation du nombre de Mach

En utilisant l'équation 4.4 et en faisant quelques manipulations, nous obtenons l'équation 4.14 tirée de John [12].

$$f \frac{dx}{D} = \frac{\frac{dA}{A} - \left[\mathcal{M}^2 - 1 + \left(\frac{\mathcal{M}^2}{2} + \frac{1}{2} \right) \left[- \frac{(\gamma-1)M^2}{1 + \frac{(\gamma-1)}{2} M^2} \right] \frac{dM}{M} \right]}{2\mathcal{M}^2} \quad (4.14)$$

Puisque toutes les valeurs dépendent de M, nous devons donc avoir une équation pour dM/dx. En réarrangeant 4.14, nous obtenons 4.15 qui provient du même auteur.

$$\frac{dM}{dx} = \frac{\left(\frac{-2\gamma M^3}{D} + \frac{M}{A} \frac{dA}{dx} \right)}{\left[\gamma M^2 - 1 + \left(\frac{\gamma M^2}{2} + \frac{1}{2} \right) \left[-\frac{(\gamma-1)M^2}{1 + \frac{(\gamma-1)}{2} M^2} \right] \right]} \quad (4.15)$$

4.1.3 Calcul de la variation de pression

En substituant 4.10 dans 4.4, et en exprimant dT/T en fonction de dM/M nous obtenons l'équation 4.16 de Alexandrou[11] à laquelle nous avons ajouté le terme tenant compte de la variation de section.

$$\frac{dP}{P} = -\frac{dA}{A} - \left[\frac{2 + 2(\gamma-1)M^2}{2 + (\gamma-1)M^2} \right] \frac{dM}{M} \quad (4.16)$$

Avec quelques manipulations, nous obtenons 4.17 :

$$\frac{dP}{dx} = -P \left[\frac{1}{A} \frac{dA}{dx} + \left[\frac{2 + 2(\gamma-1)M^2}{2 + (\gamma-1)M^2} \right] \frac{1}{M} \frac{dM}{dx} \right] \quad (4.17)$$

4.1.4 Calcul de la friction

Afin d'évaluer le coefficient de friction f , nous utiliserons des équations basées uniquement sur le nombre de Reynolds, ceci permettra un calcul assez rapide. En effet, les calculs du coefficient de friction faisant intervenir la rugosité des parois sont itératifs et entraînent donc des temps de calcul plus longs. Le livre, de Hoffman [16], présente les principales corrélations permettant le calcul du coefficient de friction. Dans le cas où le conduit n'est pas rugueux et où on souhaite accélérer l'algorithme, l'équation suivante peut constituer une solution.

$$f = 4 \left(0.04 \text{Re}^{-0.16} \right) \quad (4.18)$$

Pour ce qui est du calcul du nombre de Reynolds, nous utilisons l'équation suivante qui provient de Alexandrou [11].

$$\text{Re}_D = \rho v \frac{D}{\mu} \quad (4.19)$$

4.2 Système d'équations du cylindre

Après avoir modélisé les conditions dans la tubulure, nous devons faire la même chose pour les conditions dans le cylindre afin de pouvoir éventuellement coupler les deux systèmes. Cette section présente donc les équations nécessaires afin de calculer les conditions dans le cylindre selon l'angle du vilebrequin. Celles-ci sont valides pour la phase d'admission et de compression. Plus tard, un système pour la phase de combustion sera établi et permettra le calcul du cycle complet. Le volume de contrôle est le cylindre tel que présenté à la figure 4-2.

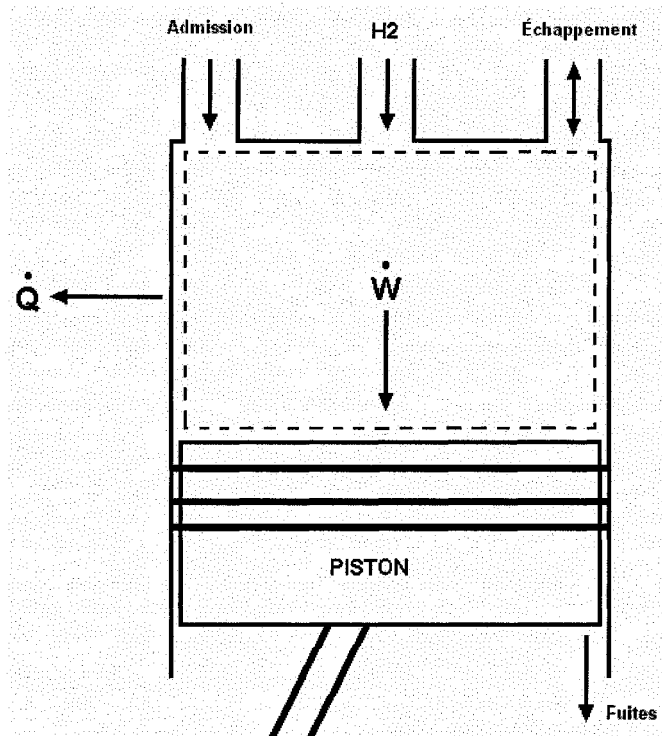


Figure 4-2 : Volume de contrôle du cylindre

Pour le calcul des conditions dans le cylindre, nous souhaiterons connaître P , T et ρ . Il nous faudra donc trois équations. Ces trois équations sont l'équation de la continuité, la conservation de l'énergie et la loi des gaz parfaits.

4.2.1 Calcul de la variation de densité

Dans le cas présent, puisque la valeur de dm/dt est connue tout comme la valeur de dV/dt , nous chercherons donc une relation pour $d\rho/dt$. Nous pouvons arranger l'équation de continuité sous la forme suivante :

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{V} \left[\frac{dm}{dt} - \rho \frac{dV}{dt} \right] \quad (4.20)$$

4.2.2 Calcul de la variation de température

Le calcul s'effectue à partir de la formule de la conservation de l'énergie 4.5. Avec la définition de l'énergie $E = mc_v T$ et de l'enthalpie totale $h_T = (h + v^2/2)$, nous pouvons trouver la formulation différentielle de l'équation d'énergie.

$$c_v \left[m \frac{dT}{dt} + T \frac{dm}{dt} \right] = \frac{dQ_{CV}}{dt} - \frac{dW_{CV}}{dt} + (\sum \dot{m} h_T)_{\text{entrant}} - (\sum \dot{m} h_T)_{\text{sortant}} \quad (4.21)$$

Avec quelques manipulations, nous obtenons enfin une équation différentielle permettant de calculer la variation de température :

$$\begin{aligned} \frac{dT}{dt} = & -\frac{(\gamma-1)}{mR} P \frac{dV}{dt} + \frac{(\gamma-1)}{mR} \frac{dQ}{dt} - \frac{T}{m} \frac{dm}{dt} + \\ & \frac{(\gamma-1)}{mR} \left[\left[\dot{m} \left(c_p T + \frac{v^2}{2} \right) \right]_{AIR} + \left[\dot{m} \left(c_p T + \frac{v^2}{2} \right) \right]_{H2} + \left[\dot{m} \left(c_p T + \frac{v^2}{2} \right) \right]_{EXH} \right] + \gamma C T \end{aligned} \quad (4.22)$$

Ici, $C = \dot{m}_{\text{lost}}/m$ et est définie par Ferguson [10]. D'après l'équation 4.22, la valeur de \dot{m}_{lost} doit être négative pour satisfaire l'équation. Selon Ferguson, les pertes durant l'admission et la compression peuvent être supposées nulles. La valeur des pertes de masse totale sur un cycle peut être estimée à environ 2.5% selon Ferguson et celles-ci se produisent durant la combustion où les pressions sont très élevées. Il utilise 0.77 comme valeur de la constante C. Les débits d'air et d'hydrogène sont positifs tandis que le débit d'échappement peut être soit positif ou négatif. On appelle « backflow » le retour de gaz d'échappement dans le cylindre durant l'admission. Ce phénomène est discuté dans Heywood [9] et survient bien sûr durant la période de chevauchement entre l'ouverture des soupapes d'admission et d'échappement. Les temps d'ouverture et de fermeture des soupapes d'échappement ne sont pas connus. Il est donc supposé qu'elles ouvrent 60° BBDC et qu'elles ferment 20° ATDC, ceci est compatible avec Heywood [9]. Donc, durant les premiers 20° de la phase d'admission, il peut y avoir un retour de gaz brûlé qui s'ajoute au gaz résiduel. Pour ces 20°, l'ouverture des soupapes est très petite, donc le retour des gaz d'échappement sera négligé. Nous gardons cependant le terme dans l'équation afin d'avoir un modèle plus souple.

4.2.3 Calcul de la variation de pression

Pour ce calcul, nous utiliserons la formulation différentielle de l'équation des gaz parfaits :

$$\frac{dP}{dt} = R \left[\rho \frac{dT}{dt} + T \frac{d\rho}{dt} \right] \quad (4.23)$$

4.2.4 Calcul de la variation de la quantité de chaleur

Durant la phase présente, l'équation de dQ/dt se réduit à l'équation 4.24 selon Ferguson [10] :

$$dQ/dt = hA(T - T_w) \quad (4.24)$$

Le coefficient de transfert de chaleur instantanée h est calculé avec la corrélation de Woschni qui est présentée dans le livre de Richard Stone [40] :

$$h = 0.82b^{-0.2}P^{0.8}u^{0.8}T^{-0.53} \quad (\text{kW/m}^2\text{K}) \quad (4.25)$$

P = Pression instantanée (MPa)

T = Température instantanée des gaz (K)

b = Diamètre du cylindre (m)

u = Vitesse de référence

$$u = C_1 v_p + C_2 \frac{V_s T_r}{P_r V_r} (P - P_m)$$

V_s = Volume déplacé

v_p = Vitesse piston

$$P_m = P_r \left(\frac{V_r}{V} \right)^{1.3}$$

P_r , T_r , V_r sont évalués à une condition de référence, par exemple, à la fermeture de la soupape d'admission.

La valeur des constantes C_1 et C_2 dépend de la phase.

Admission : $C_1 = 6.18$, $C_2 = 0$.

Compression : $C_1 = 2.28$, $C_2 = 0$.

Combustion-expansion : $C_1 = 2.28$, $C_2 = 3.24 \times 10^{-3}$.

4.3 Approche utilisée pour la modélisation de l'admission

La modélisation de l'admission (partie tubulure) permettra de connaître le débit à la soupape de façon itérative. Comme mentionné plus haut, deux systèmes d'équations seront nécessaires, soit un système représentant les conditions dans le cylindre et l'autre, représentant les conditions dans la tuyère d'admission. L'approche utilisée a l'avantage d'être simple et avec certaines approximations, elle permettra des temps de calcul faibles. Les indices T et C seront respectivement employés pour désigner la tuyère et le cylindre. La façon de procéder est la suivante : à l'entrée de la tuyère d'admission, nous connaissons la pression P_{1T} et la température T_{1T} , qui correspondent aux conditions dans le collecteur d'admission. Ces deux variables sont donc affectées par les gaz EGR ou bien par l'ajout d'un turbocompresseur. En effet, les gaz EGR sont très chauds puisqu'il s'agit de gaz brûlé. La température et la pression de l'air ayant été compressé par le compresseur sont bien sûr plus élevées que la température et pression ambiante. Nous posons un nombre de Mach M_{1T} et nous calculons les conditions partout à l'intérieur de la tuyère. Les valeurs qui nous intéressent particulièrement sont celles à la soupape, qui par hypothèse, correspondent aux conditions dans le cylindre. Il faut donc à cette étape choisir un maillage qui permettra une convergence des résultats et un temps de calcul raisonnable. En connaissant M_{2T} et les conditions à la soupape (P_{2T} , T_{2T}),

nous pouvons calculer le débit (\dot{m}_{2T}) à cet endroit. Avec cette valeur de débit, les conditions initiales dans le cylindre P_{1C} , T_{1C} , m_{1C} , V_{1C} et $dV/d\theta$, il est possible de calculer les nouvelles conditions dans ce dernier, soit P_{2C} , T_{2C} , m_{2C} et V_{2C} . Une fois que nous avons calculé ces valeurs, nous devons vérifier si $P_{2C} = P_{2T}$. La convergence se fait donc sur la pression. Si P_{2T} à la sortie de la tuyère n'est pas égal à P_{2C} dans le cylindre, il faut recommencer le calcul pour un autre nombre de Mach M_{1T} à l'entrée de la tuyère et ce, jusqu'à convergence des résultats. La figure 4-3 présente l'ordinogramme de ce calcul. Notez que le dimensionnement de la tubulure d'admission et de la soupape est présenté dans l'appendice B.

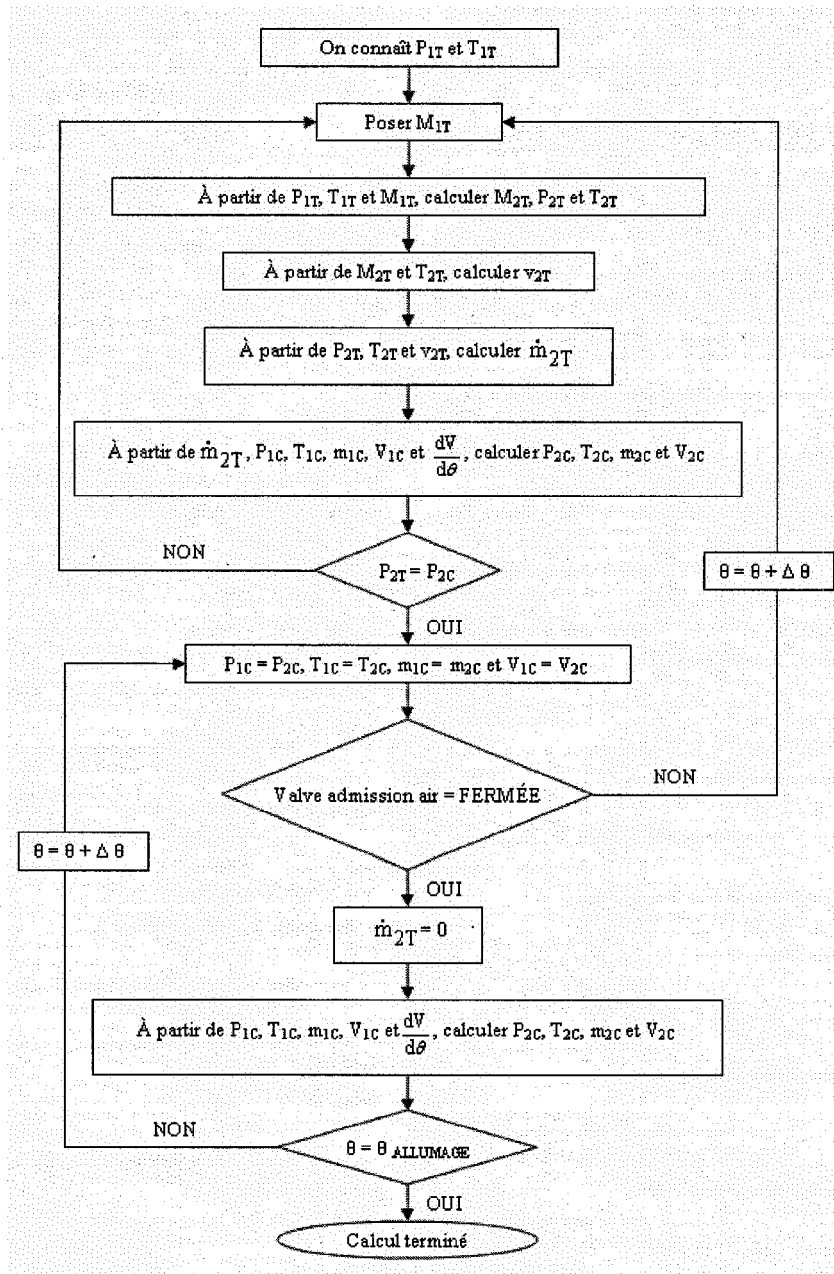


Figure 4-3 : Ordinogramme du calcul de l'admission

Dans cette forme, la méthode est très fastidieuse à résoudre puisque pour chaque nouvelle valeur de M_{IT} , il faut effectuer tous les calculs. Afin d'accélérer les temps de calcul, nous utiliserons le rapport du nombre de Mach à l'entrée (Min) sur le nombre de Mach à l'entrée provoquant l'étranglement (Mach = 1) à la soupape (Min*). Aussi, pour une ouverture de soupape A_v donnée, nous calculerons et tracerons les graphiques de la pression et du débit à la soupape en fonction du rapport Min/Min*. Ces valeurs seront appelées valeur de référence. Cette approche ressemble à celle présentée par Heywood [9], mais ici, nous ne travaillons pas avec des valeurs expérimentales. La figure 4-4 présente les graphiques de la pression et du débit à la sortie de la soupape en fonction de Min/Min* pour une levée L_v de 0.1 mm. Ce sont ces valeurs qui seront utilisées par le simulateur. Le graphique de la pression de la figure 4-4 sera utilisé pour chaque nouvelle valeur de L_v .

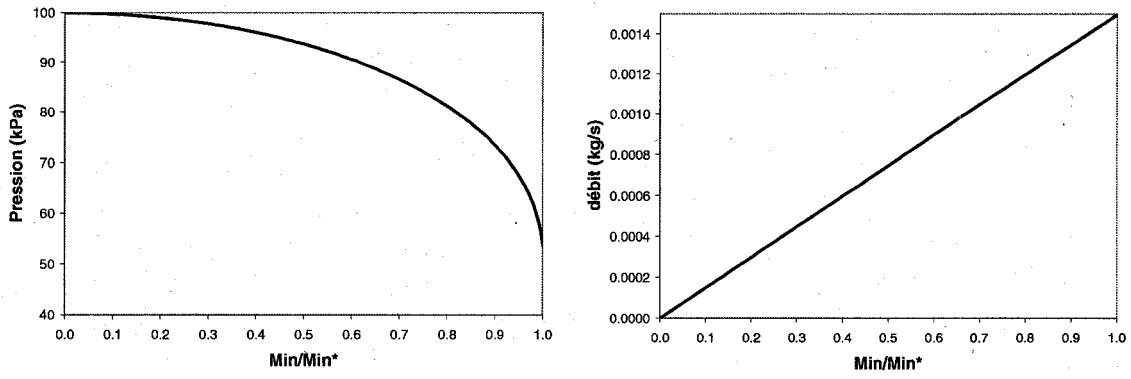


Figure 4-4 : Courbes de références de la pression et du débit

Pour ce qui est du débit, il est bien sûr différent pour chaque différente valeur de L_v , le graphique du débit de la figure 4-4 ne peut donc pas être utilisé pour toutes les valeurs de L_v . Cependant, sa variation est directement proportionnelle au nombre de Mach à l'entrée [9]. En utilisant les valeurs critiques de P et T , ainsi que A_v , on peut calculer, à l'aide de l'équation 4.26 [9], la valeur maximale du débit pour chaque valeur de L_v . Ensuite, il suffit de tracer une droite entre 0 et \dot{m}_{\max} afin de pouvoir connaître les valeurs intermédiaires. Les valeurs critiques de P et T sont respectivement $0.528P_{IT}$ et $0.833 T_{IT}$ selon Alexandrou [11]. Les résultats des simulations convergent effectivement sur ces valeurs.

$$\dot{m}_{\max} = A_v \frac{P_v^*}{RT_v^*} \sqrt{\gamma RT_v^*} \quad (4.26)$$

En utilisant le rapport Min/Min*, nous n'avons plus besoin de faire les nombreux calculs des conditions dans la tubulure en fonction du Mach à l'entrée. Cette solution permet donc de faire le calcul des conditions à la soupape une seule fois. Ceci évitant du même coup le long processus itératif dans la tuyère tel que décrit plus haut. La clé de la solution étant l'utilisation du rapport Min/Min*. La friction affecte bien les courbes de la figure 4-4, pour cette raison, la section 4.5.2 est consacrée à ce sujet.

Il est important de mentionner que le calcul de l'admission doit être effectué pour chaque simulation, car l'ajout des gaz EGR ou d'un turbo affecte les conditions P_{IT} et T_{IT} à l'entrée de la tuyère. Étant donné que les gaz EGR sont des gaz brûlés, leur ajout entraîne aussi une modification de la constante R . Les débits correspondants aux pressions de référence de la figure 4-4 sont donc grandement influencés. Pour cette raison, l'idée de faire un long pré-calcul du rendement volumétrique en fonction du rpm est donc à rejeter. Aussi, avec les modifications apportées au moteur, l'injection de l'hydrogène pourra entraîner une surpression dans le cylindre. Si l'injection débute trop tôt, elle aura aussi un effet néfaste sur le rendement volumétrique. C'est d'ailleurs le principal avantage de ce simulateur, il permet d'introduire l'effet de l'ajout du carburant.

Pour les simulations de la phase d'admission, les gens utilisent normalement un coefficient C_d pour corriger la section effective de la soupape en fonction de L_v . L'appendice C présente ce coefficient ainsi qu'une discussion sur le rendement volumétrique. Un pas de un degré est utilisé pour la simulation de l'admission et de la compression.

4.4 Hypothèses et simplifications

Plusieurs simplifications et hypothèses ont dû être posées afin de pouvoir résoudre le problème. D'abord, il faut mentionner que certains effets sont trop complexes pour être modélisés. Par exemple, lorsque le piston a atteint le point mort bas et qu'il remonte, même si la pression dans le cylindre est égale à la pression dans le système d'admission, l'air continu d'entrer. Ceci est dû à l'inertie des gaz. La méthode de calcul ne permet pas de prendre en compte de tel effet. Puisque le moteur dont nous tentons de faire la modélisation possède une soupape d'admission d'air en moins, la pression dans le cylindre sera inférieure à la pression atmosphérique dans la plupart des cas. Évidemment, plus le RPM augmente, plus la dépression dans le cylindre augmentera. Aussi, au point mort haut, en début d'admission, les deux soupapes d'échappement sont ouvertes en même temps que la soupape d'admission. Des gaz brûlés peuvent donc se retrouver dans l'admission à cause des « backflow » discutés en 4.2.2. Voilà un autre point trop complexe à modéliser. Cependant, en connaissant les pressions dans le système d'admission et d'échappement, on peut tirer certaines conclusions. Voici donc les hypothèses et simplifications :

- La présence des autres cylindres n'est pas considérée dans cette simulation;
- La modélisation est en une dimension seulement;
- Nous négligeons les échanges de chaleur dans la tubulure d'admission;
- Nous supposons un écoulement permanent;
- Nous négligeons les phénomènes liés à la turbulence;
- Le moteur opère à pleine charge, la pression dans le collecteur d'admission est donc près de la pression ambiante;
- Les conditions à la soupape sont les mêmes que dans le cylindre;
- Nous ne modélisons pas le collecteur d'admission;

- Les courbures de la tubulure sont représentées par une longueur équivalente.

4.5 Résultats des simulations pour la partie admission

Cette section présente les résultats concernant la simulation de l'admission seulement. L'effet du maillage sur les résultats sera d'abord présenté. Ensuite, les effets de la friction et du coefficient C_d seront abordés. Plusieurs résultats seront ensuite présentés, ceux-ci concernant l'évolution des conditions dans la tuyère d'admission et l'évolution des conditions dans le cylindre avec et sans injection d'hydrogène.

4.5.1 Effet du maillage

Le maillage du système d'admission (voir figure B-1 de l'appendice B) a un effet sur les résultats. Étant donnée l'approche utilisée, le maillage n'affecte pas le temps de calcul, mais il est quand même intéressant de voir l'impact d'un mauvais choix de maillage pour le calcul des valeurs de référence de la pression. Dans la section de la tubulure et de la tubulure à section convergente, le maillage affecte peu les résultats, car les vitesses en jeu sont faibles. Les pas utilisés dans la tubulure et la tubulure à section convergente sont respectivement 10 et 1 mm. Les figures 4-5 et 4-6 qui suivent présentent l'influence du maillage de la soupape sur le calcul des valeurs de références de la pression et du débit à la soupape pour une levée de 0.1 mm. Comme nous pouvons le constater sur la figure 4-5, avec un maillage trop grossier, le calcul de la pression à la sortie de la soupape très différent. La valeur critique pour $Min/Min^*=1$ converge vers une valeur légèrement supérieure à la valeur réelle de 52 kPa, ceci entraînera donc une légère surévaluation du débit maximal.

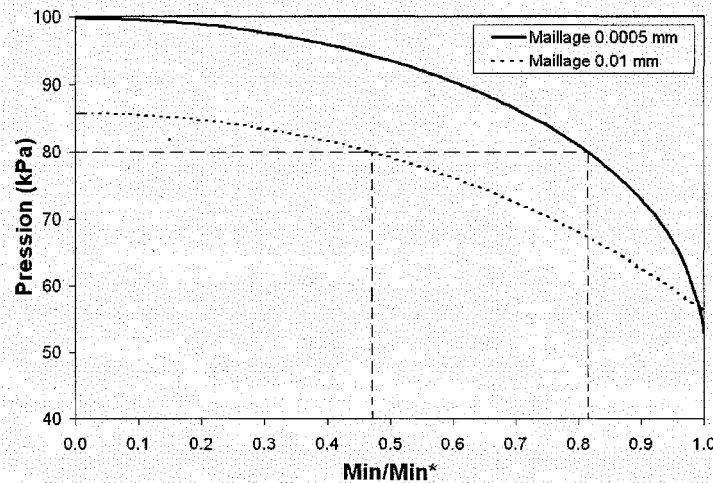


Figure 4-5 : Effet du maillage sur la pression à la soupape

Pour ce qui est des débits à la soupape de la figure 4-6, ils sont également affectés par le maillage. Bien que les valeurs soient peu affectées, c'est dans l'utilisation du graphique de la pression que l'erreur survient.

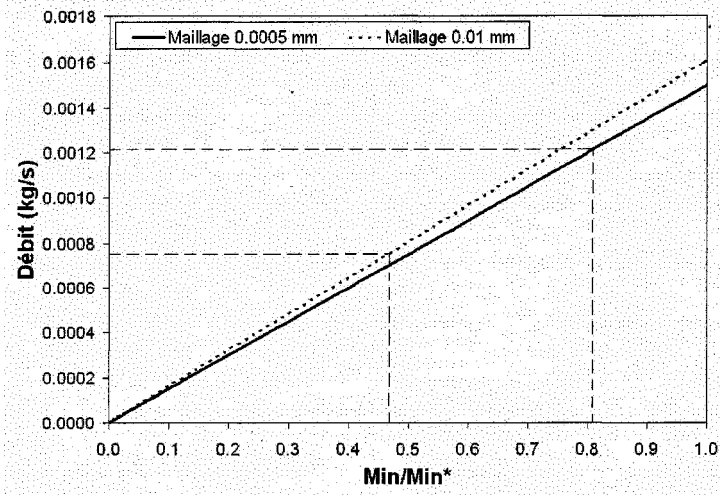


Figure 4-6 : Effet du maillage sur les débits à la soupape

Pour mieux comprendre, voici un exemple : supposons que la pression dans le cylindre est de 80 kPa et que nous voulons trouver le débit correspondant pour $L_v = 0.1$ mm. La première étape est bien sûr de construire le graphique de la figure 4-6 en utilisant les valeurs critiques de la pression et de la température. Pour connaître le débit correspondant à $P=80$ kPa, il suffit de trouver le rapport Min/Min^* qui correspond à 80 kPa. À partir de ce rapport, nous pourrions déduire la valeur du débit de façon directe. Selon le maillage utilisé pour la soupape, la lecture du rapport Min/Min^* peut donc entraîner une grande erreur sur le débit. En effet, dans le graphique 4-5, pour un pas de 0.01 mm, nous déduirions un rapport Min/Min^* d'environ 0.47 tandis que pour un pas de 0.0005, le rapport correspondant est d'environ 0.82. Dans ce cas, nous aurions sous-estimé le débit correspondant. Au lieu de la valeur réelle de 0.00122 kg/s correspondant à $Min/Min^* = 0.82$, nous aurions conclu à un débit de 0.00077 kg/s correspondant à $Min/Min^* = 0.47$. Pour ce cas précis, l'erreur sur le débit aurait été de plus de 35 %. Nous pouvons aussi constater que pour une pression supérieure à 86 kPa, il n'y a aucun écoulement dans le cas du maillage grossier. Le choix du maillage peut donc entraîner des erreurs très importantes. Puisque le calcul de la courbe 4-5 s'effectue une seule fois pour une levée donnée, l'utilisation d'un maillage fin ne nuira en rien au temps de calcul.

4.5.2 Effet de la friction

Avec l'approche choisie pour accélérer les calculs, il est clair que l'effet de la friction ne pourra pas être tenu en compte pour chaque différente valeur de L_v . Un compromis devra donc être fait. L'effet de la friction est une réduction du débit d'air [11] et cet effet s'intensifie quand A_v augmente. L'effet de la friction pour A_v très petit est négligeable, car les vitesses en jeu sont faibles. Nous pouvons voir, sur la figure 4-7, l'influence de la friction sur la pression et le débit à la soupape en fonction du rapport Min/Min^* pour une levée de 3.1 mm.

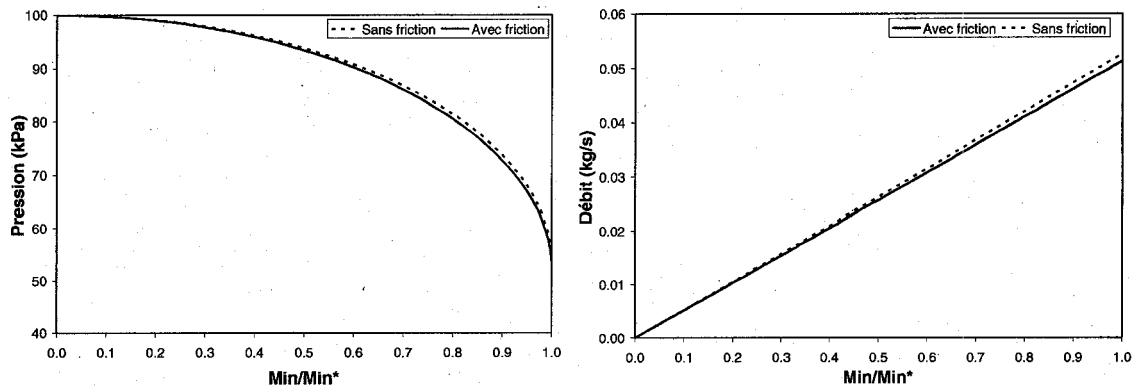


Figure 4-7 : Influence de la friction pour une faible ouverture de soupape

Comme nous pouvons le constater, l'effet de la friction est presque négligeable. Pour A_v plus grand, l'effet de la friction n'est pas négligeable. La figure 4-8 présente la pression et le débit pour une levée de 8 mm. En comparant les graphiques des figures 4-7 et 4-8, nous voyons bien que l'effet est beaucoup plus important pour la levée de 8mm.

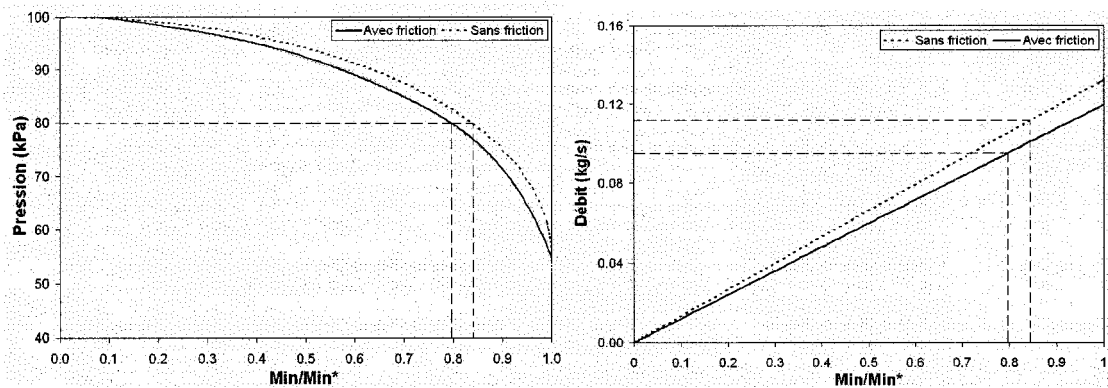


Figure 4-8 : Influence de la friction pour une grande ouverture de soupape

Pour vérifier l'impact de la friction, il faut utiliser la même démarche qu'à la section 4.5.1. Si nous utilisons encore une pression de 80 kPa dans le cylindre, nous obtiendrons une erreur sur le débit d'environ 15%. Pour le cas présent, négliger la friction entraîne une surévaluation de la valeur du débit calculé. C'est donc dire que si le graphique de référence de P (figure 4-8) est créé à partir d'une levée très faible (équivalent aux courbes sans friction), il y aura surévaluation du débit pour les grandes valeurs de L_v (conditions affectées par la friction). L'inverse est aussi vrai, si on utilise une valeur élevée de L_v pour former le graphique référence de P, il y aura une sous-évaluation des débits pour les petites valeurs de L_v . Cependant, l'impact est plus complexe que cela. Effectivement, la pression dans le cylindre sera affectée par la modification des débits.

Par exemple, analysons le cas où la courbe de référence est celle pour une faible levée (figure 4-8 sans friction). Au début de la phase d'admission, les conditions seront correctement calculées. À partir d'un certain moment (L_v élevée), il y aura une surévaluation de la pression dans le cylindre, car des valeurs de L_v élevées auront entraîné une surévaluation des débits. Or, nous pouvons voir, sur la figure 4-8, que l'augmentation de la pression par rapport à la valeur réelle, entraîne une diminution du débit à la soupape. Pour l'exemple de 80 kPa dans le cylindre, la surévaluation de la pression dans le cylindre entraîne une diminution de l'erreur sur le calcul du débit. Suite à cet exemple, nous pouvons comprendre la complexité à trouver une solution équitable.

La solution retenue est celle du calcul des valeurs de référence de pression à partir d'une valeur de L_v faible. Puisque nous avons négligé l'inertie des gaz, cette solution sera en quelque sorte une correction.

4.5.3 Effet du coefficient de décharge

Pour ce qui est du coefficient de décharge C_d , il ne fait que corriger la section effective de la soupape, tel que discuté à l'appendice C. La figure 4-9 montre l'effet du coefficient C_d .

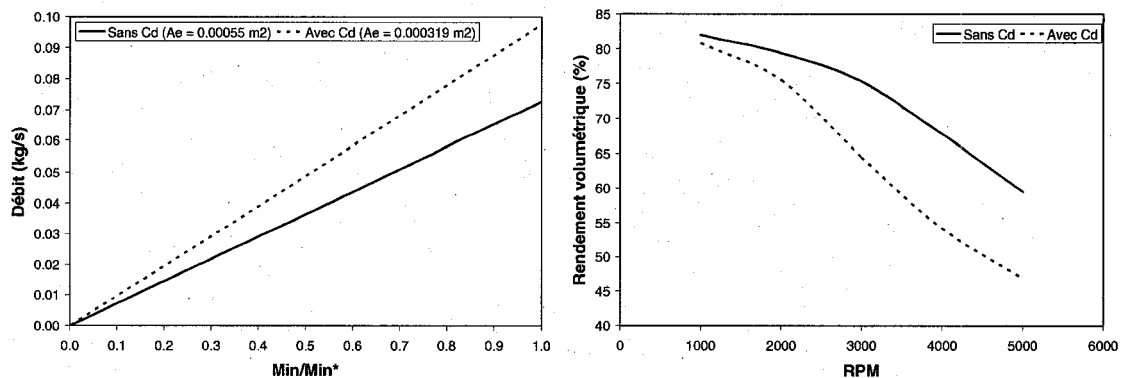


Figure 4-9 : Influence du coefficient C_d

Comme nous pouvons le voir sur la figure 4-9, le coefficient affecte directement le débit à la soupape en corrigeant simplement l'aire effective. Le nouveau débit correspond donc tout simplement au débit pour une section plus faible. La figure 4-9 présente l'effet du coefficient C_d sur le rendement volumétrique du moteur. Comme nous pouvions nous y attendre, le coefficient C_d entraîne une diminution du rendement volumétrique. L'utilisation du coefficient C_d dépendra des résultats expérimentaux.

4.5.4 Évolution des conditions dans la tubulure

La section qui suit présente l'évolution des conditions dans la tuyère d'admission pour un nombre de Mach à l'entrée provoquant l'étranglement ($Mach = 1$) à la soupape. Voici d'abord l'évolution du nombre de

Mach dans le système d'admission. L'axe des abscisses représente la position en x dans la tuyère, tel que présenté à la figure B-1 de l'appendice B.

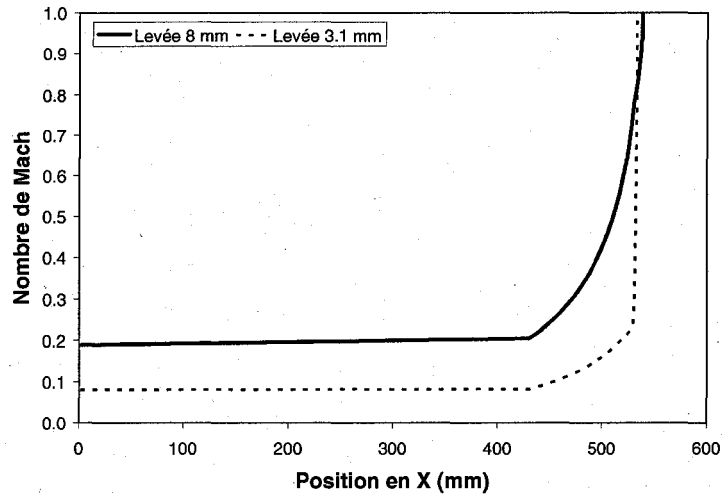


Figure 4-10 : Évolution du nombre de Mach dans la tuyère

Nous pouvons constater que les vitesses dans la section tubulaire à rayon constant sont faibles. La figure 4-11 présente l'évolution de la température et de la pression dans la tuyère.

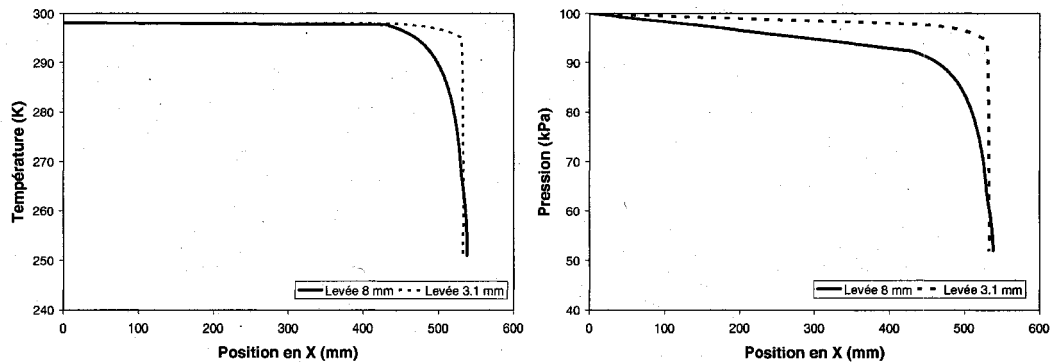


Figure 4-11 : Évolution de T et P dans la tuyère

Nous remarquons deux discontinuités dans les courbes, plus apparentes pour la levée de 3.1 mm, qui s'explique par le changement dans la variation de section. La tubulure à section convergente a une variation de section plus grande que la tubulure dont la variation de section est nulle. Dans le cas de la levée de 3.1 mm, la variation de section dans la soupape est plus importante que dans le convergent, c'est ce qui explique à la position 430 mm et 530 mm, un changement dans l'évolution des différentes variables M, P et T.

4.5.5 Évolution des conditions dans le cylindre

La figure 4-12 présente l'évolution de la pression dans le cylindre durant la phase d'admission et de compression pour deux valeurs de régime du moteur. La pression de départ tient compte de la pression

d'échappement et des gaz résiduels. La pression de l'échappement est calculée avec une relation tirée de Heywood [9]. Les conditions finales sont celles au point mort haut. Les résultats sont donnés pour un régime de 1000 et 5000 rpm.

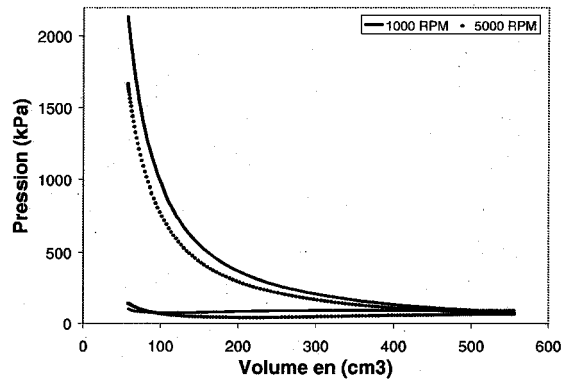


Figure 4-12 : Évolution de la pression dans le cylindre

Nous constatons que la dépression dans le cylindre est supérieure pour le régime de 5000 rpm. La pression en fin de compression est plus élevée pour 1000 rpm puisque la quantité d'air admise est plus grande. La pression en début de compression est de 90 kPa et 68 kPa pour 1000 et 5000 rpm respectivement. Regardons maintenant l'effet de l'ajout d'hydrogène sur l'évolution de la pression.

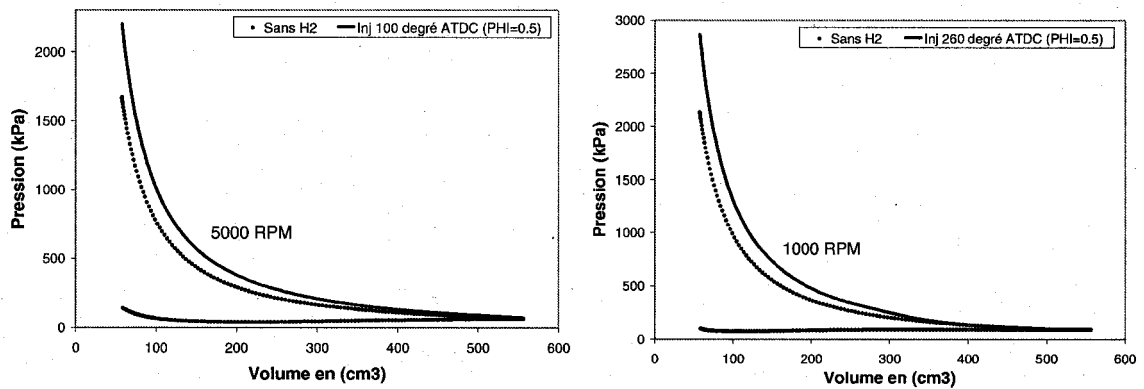


Figure 4-13 : Effet de l'ajout d'hydrogène sur la pression

Comme nous pouvions nous y attendre, l'ajout d'hydrogène entraîne une augmentation des pressions dans le cylindre. Pour ce qui est de la température, la figure 4-14 présente son évolution pour 1000 et 5000 rpm.

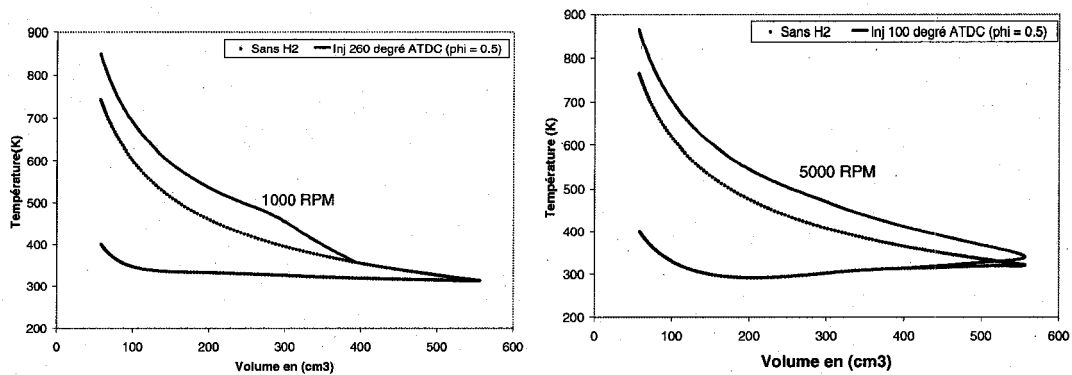


Figure 4-14 : Effet de l'ajout d'hydrogène sur la température

Puisque le moment d'injection diffère dans les deux cas, l'allure des deux courbes de la figure 4-14 n'est donc pas la même. L'ajout d'hydrogène entraîne une augmentation de la température.

4.5.6 Effet de l'injection d'hydrogène sur la masse d'air entrant dans le cylindre

Selon le moment où l'injection d'hydrogène débute, la quantité d'air admise dans le cylindre sera plus ou moins affectée. La figure 4-15 présente cet effet pour une vitesse de 2000 rpm. Le symbole Φ (phi) est défini à la section 5.2.

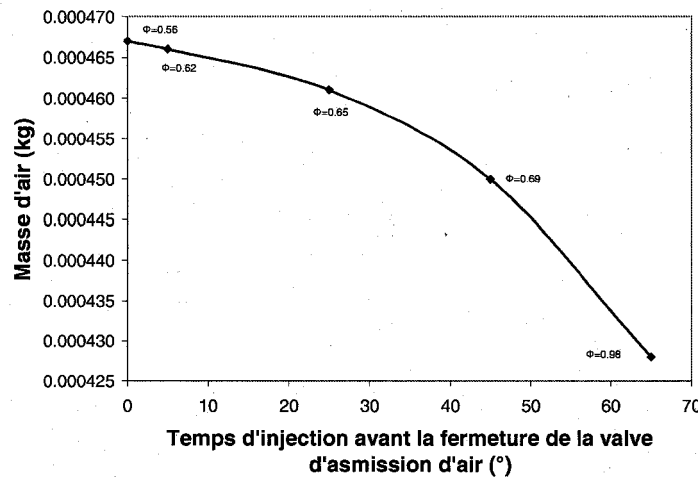


Figure 4-15 : Effet de l'ajout d'hydrogène sur la masse d'air frais

On peut voir que plus l'injection commence tôt, plus l'impact sur la masse d'air est grand. Bien sûr, si l'injection a lieu après la fermeture de la soupape d'admission d'air, il n'y aura aucun impact sur la quantité d'air admis. L'impact varie selon le régime du moteur et est plus important pour les bas régimes. À plus haut régime, l'injection d'hydrogène se fait plus tôt, mais le rendement volumétrique est plus bas, dans ce cas, l'hydrogène ne fait que remplacer la quantité d'air manquante. Dans le cas d'un régime de 2000 rpm,

l'ajout d'hydrogène pour un mélange stoechiométrique entraîne une diminution d'environ 8.5 % de la quantité d'air admis.

5 MODÉLISATION DE LA COMBUSTION

La section qui suit présente le système d'équations utilisé pour modéliser la combustion. La première partie du chapitre présente les équations nécessaires pour le calcul de l'évolution des conditions dans le cylindre. La seconde partie présente les équations utilisées pour le calcul de l'évolution des espèces chimiques dans les gaz brûlés. Normalement, un logiciel commercial comme CHEMKIN (www.reactiondesign.com) ou KIVA est utilisé à cette fin. Il a cependant été décidé de programmer un modèle de combustion pour mieux l'intégrer dans notre simulateur. Nous disposons ainsi d'un modèle complet plus souple d'utilisation.

5.1 Système d'équations pour la combustion

Le système d'équations qui est utilisé est basé sur les travaux de Ferguson [10]. Ces travaux sont extrêmement bien détaillés et l'auteur considère un gaz semi-parfait plutôt qu'idéal, c'est-à-dire qu'il ne néglige pas la dépendance à la température de la chaleur massique. Aussi, la constante des gaz, R , est calculée à chaque itération et est fonction de chacun des constituants du mélange. Afin de pouvoir simuler l'évolution du système, il faut connaître en tout temps, P , T_u et T_b . Nous aurons donc besoin de trois équations pour résoudre ce système à trois inconnues. Un module sera aussi nécessaire pour calculer la concentration de chacune des espèces dans le mélange brûlé et non brûlé.

Pour un volume de contrôle contenant un mélange de carburant et d'air, la variation de masse du système ouvert est donnée par :

$$\dot{m} = \sum_j \dot{m}_j \quad (5.1)$$

En appliquant la première loi de la thermodynamique à un système ouvert, l'équation d'énergie prend la forme suivante :

$$\dot{E} = \dot{Q} - \dot{W} + \sum_j \dot{m}_j h_j \quad (5.2)$$

Ici, $\dot{Q} = \dot{Q}_{IN} - \dot{Q}_{LOST}$. En fonction de l'angle θ , ces deux équations peuvent être réécrites comme suit :

$$\frac{dm}{d\theta} = \sum_j \frac{d\dot{m}_j}{d\theta} \quad (5.3)$$

$$m \frac{du}{d\theta} + u \frac{dm}{d\theta} = \frac{dQ}{d\theta} - P \frac{dV}{d\theta} + \sum h_{lost} \frac{d\dot{m}_{lost}}{d\theta} \quad (5.4)$$

Il manque donc deux équations, celles-ci seront présentées plus loin.

- **Calcul de la variation de l'énergie interne**

En décomposant ce terme, nous obtenons : $m \frac{du}{d\theta} = m_b \frac{du_b}{d\theta} + u_b \frac{dm_b}{d\theta} + m_u \frac{du_u}{d\theta} + u_u \frac{dm_u}{d\theta}$ ce qui donne en terme de (x), la fraction de gaz brûlé :

$$m \frac{du}{d\theta} = m \left[x \frac{du_b}{d\theta} + (1-x) \frac{du_u}{d\theta} + (u_b - u_u) \frac{dx}{d\theta} \right] \quad (5.5)$$

Nous aurons besoin d'une équation pour décrire u. Dans un modèle à deux zones, nous devons traiter ces dernières séparément. L'énergie interne est donc décrite selon Ferguson [10] par :

$$u = \frac{U}{m} = xu_b + (1-x)u_u \quad (5.6)$$

La dérivation de cette équation par rapport à θ peut être généralisé comme suit :

$$\frac{du_i}{d\theta} = \frac{\partial u_i}{\partial T_i} \frac{dT_i}{d\theta} + \frac{\partial u_i}{\partial P} \frac{dP}{d\theta} \quad (5.7)$$

Où l'indice (i) représente soit les gaz brûlés ou les gaz non brûlés. Une fois résolue, cette équation prend la forme suivante :

$$\frac{du_i}{d\theta} = \left(cp_i - \frac{Pv_i}{T_i} \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln T_i} \right) \frac{dT_i}{d\theta} - v_i \left(\frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln T_i} + \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln P} \right) \frac{dP}{d\theta} \quad (5.8)$$

Les détails du calcul sont présentés dans l'appendice D.2. En utilisant l'équation 5.8 dans l'équation 5.5, nous obtenons l'expression suivante :

$$\begin{aligned} m \frac{du}{d\theta} = & mx \left[cp_b - \frac{Pv_b}{T_b} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right] \frac{dT_b}{d\theta} + m(1-x) \left[cp_u - \frac{Pv_u}{T_u} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right] \frac{dT_u}{d\theta} \\ & - \left[mxv_b \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} + \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} \right) + m(1-x)v_u \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} + \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln P} \right) \right] \frac{dP}{d\theta} \\ & + m(u_b - u_u) \frac{dx}{d\theta} \end{aligned} \quad (5.9)$$

- **Calcul de la variation de masse**

Durant la combustion, les soupapes sont fermées, il n'y a donc pas de changement occasionné sur la masse du mélange. Cependant, il y a des fuites au niveau des éléments d'étanchéités. Les pertes par fuites sont exprimées en fonction d'un coefficient de fuite C.

$$\frac{dm}{d\theta} = -\frac{1}{w} \frac{dm}{dt} = -\frac{\dot{m}_\ell}{w} = -\frac{Cm}{w}, \text{ où } C = \frac{\dot{m}_\ell}{m}$$

La valeur de C est un paramètre ajustable qui est présentée dans Ferguson [10].

- **Calcul de la variation de la quantité de chaleur**

La perte de chaleur aux parois est exprimée comme suit : $\frac{dQ}{d\theta} = \frac{-\dot{Q}_\ell}{w} = \frac{-\dot{Q}_b - \dot{Q}_u}{w}$ (5.10)

Où : $\dot{Q}_{lost} = \frac{dQ}{dt}$. Rappelons-nous que $\frac{d}{dt} = w \frac{d}{d\theta}$. Nous avons donc les pertes pour les gaz brûlés et non brûlés :

$$\dot{Q}_b = h_b A_b (T_b - T_w) \quad (5.11)$$

$$\dot{Q}_u = h_u A_u (T_u - T_w) \quad (5.12)$$

Le terme de la variation de quantité de chaleur enlevée, dQ/dt , utilisée dans l'équation 5.4, ne tient pas compte de la quantité de chaleur dégagée par la combustion, car celle-ci est prise en compte dans l'énergie interne du mélange. Ici, A_b et A_u représentent respectivement les surfaces exposées aux gaz brûlés et non brûlés. Le coefficient de transfert de chaleur est représenté par h , qui est bien entendu différent pour les deux zones. La température des parois du cylindre est T_w . Le calcul des coefficients de transfert de chaleur h_b et h_u a été présenté à la section 4.2.4.

- **Calcul de l'enthalpie des gaz perdus**

L'enthalpie des gaz perdus est calculée en fonction de la fraction massique brûlée : $h_\ell = (1-x^2)h_u + x^2 h_b$.

Cette équation est aussi tirée de Ferguson [10] et indique que plus de gaz perdus proviennent des gaz non brûlés au début de la combustion. En introduisant tous ces termes dans l'équation 5.4, nous nous retrouvons avec l'équation suivante :

$$\begin{aligned} & mx \left[cp_b - \frac{Pv_b}{T_b} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right] \frac{dT_b}{d\theta} + m(1-x) \left[cp_u - \frac{Pv_u}{T_u} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right] \frac{dT_u}{d\theta} \\ & - \left[mxv_b \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} + \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} \right) + m(1-x)v_u \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} + \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln P} \right) \right] \frac{dP}{d\theta} \\ & + m(u_b - u_b) \frac{dx}{d\theta} + u \frac{dm}{d\theta} = \frac{dQ}{d\theta} - P \frac{dV}{d\theta} - \frac{Cm}{w} h_{lost} \end{aligned} \quad (5.13)$$

- **Calcul de la variation des températures**

Pour ces calculs, nous devons faire intervenir l'entropie des gaz brûlés et non brûlés. Ces calculs sont présentés dans Ferguson [10] :

$$s_i = s_i(P, T_i) \quad (5.14)$$

$$\frac{ds_i}{d\theta} = \frac{\partial s_i}{\partial T_i} \frac{dT_i}{d\theta} + \frac{\partial s_i}{\partial P} \frac{dP}{d\theta} \quad (5.15)$$

Avec les équations de $\frac{\partial s_i}{\partial T_i}$ et $\frac{\partial s_i}{\partial P}$ présentées à appendice D.2, on en arrive à l'équation 5.16 :

$$\frac{ds_i}{d\theta} = \frac{cp_i}{T_i} \frac{dT_i}{d\theta} - \frac{v_i}{T_i} \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln T_i} \frac{dP}{d\theta} \quad (5.16)$$

En utilisant la variation de chaleur dans les gaz, nous obtenons :

$$\dot{Q}_b = h_b A_b (T_b - T_w) - w \frac{dH}{d\theta} - \dot{m}_l h_l \quad (5.17)$$

$$\dot{Q}_u = h_u A_u (T_u - T_w) \quad (5.18)$$

Pour ce qui est de \dot{Q}_b , le premier terme de droite représente la perte de chaleur aux parois (+), le deuxième terme représente le gain (-) de chaleur dégagé par la combustion et le troisième, la perte de chaleur liée aux fuites (+). En effet, le dernier terme est bien positif selon la définition des fuites qui sont négatives. Noter que l'effet du troisième terme influencera peu les résultats puisque les fuites sont relativement faibles. Nous pouvons écrire les équations 5.17 et 5.18 en fonction de l'entropie du système.

$$-\dot{Q}_b = mw x T_b \frac{ds_b}{d\theta} \quad (5.19)$$

$$-\dot{Q}_u = mw(1-x) T_u \frac{ds_u}{d\theta} \quad (5.20)$$

En effet :

$$\frac{dQ_i}{d\theta} = T_i \frac{ds_i}{d\theta} = m_i T_i \frac{ds_i}{d\theta} \quad (5.21)$$

$$\frac{dQ}{d\theta} = \frac{1}{w} \frac{dQ}{dt} = \frac{\dot{Q}}{w} \quad (5.22)$$

$$\dot{Q}_i = w m_i T_i \frac{ds_i}{d\theta} \quad (5.23)$$

Et nous savons que : $m_b = mx$
 $m_u = m(1-x)$

En comparant 5.17 et 5.18 avec 5.19 et 5.20 tout en substituant la valeur de 5.16, nous obtenons deux nouvelles équations :

$$cp_u \frac{dT_u}{d\theta} - v_u \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \frac{dP}{d\theta} = - \frac{h_u A_u (T_u - T_w)}{wm(1-x)} \quad (5.24)$$

$$cp_b \frac{dT_b}{d\theta} - v_b \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{dP}{d\theta} = - \frac{h_b A_b (T_b - T_w)}{wmx} + w \frac{dH}{d\theta} + \dot{m}_l h_l \quad (5.25)$$

Nous pouvons maintenant isoler les dérivés qui nous intéressent :

$$\frac{dT_b}{d\theta} = -\frac{h_b A_b (T_b - T_w)}{cp_b m w x} + \frac{v_b}{cp_b} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{dP}{d\theta} + \frac{(h_u - h_b)}{x cp_b} \left[\frac{dx}{d\theta} - (x - x^2) \frac{C}{w} \right] \quad (5.26)$$

$$\frac{dT_u}{d\theta} = -\frac{h_u A_u (T_u - T_w)}{cp_u w m (1-x)} + \frac{v_u}{cp_u} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \frac{dP}{d\theta} \quad (5.27)$$

• Calcul de la variation de pression

En utilisant les valeurs de $\frac{dT_b}{d\theta}$ et $\frac{dT_u}{d\theta}$ dans l'équation d'énergie 5.4, et en faisant plusieurs manipulations, nous trouverons une équation pour la variation de pression.

• Système global

Voici donc le système d'équations qui régira les conditions dans le cylindre durant la phase de combustion et d'expansion. Afin de simplifier l'équation de la variation de pression, les équations 5.28 à 5.32 seront utilisées.

$$f1 = \frac{1}{m} \frac{dV}{d\theta} + \frac{VC}{mw} \quad (5.28)$$

$$f2 = \left[\frac{1}{wm} \left(\frac{v_b}{cp_b} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{h_b A_b (T_b - T_w)}{T_b} + \frac{v_u}{cp_u} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \frac{h_u A_u (T_u - T_w)}{T_u} \right) \right] \quad (5.29)$$

$$f3 = \left[-(v_b - v_u) \frac{dx}{d\theta} - v_b \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{(h_u - h_b)}{cp_b T_b} \left(\frac{dx}{d\theta} - (x - x^2) \frac{C}{w} \right) \right] \quad (5.30)$$

$$f4 = x \left[1x10^{-7} \frac{v_b^2}{cp_b T_b} \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right)^2 + 1x10^{-6} \frac{v_b}{P} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} \right] \quad (5.31)$$

$$f5 = (1-x) \left[1x10^{-7} \frac{v_u^2}{cp_u T_u} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)^2 + 1x10^{-6} \frac{v_u}{P} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln P} \right] \quad (5.32)$$

$$\frac{dP}{d\theta} = 1 \times 10^{-6} \left(\frac{f1 + f2 + f3}{f4 + f5} \right) \quad (5.33)$$

$$\frac{dT_b}{d\theta} = -\frac{h_b A_b (T_b - T_w)}{cp_b mwx} + 0.1 \frac{v_b}{cp_b} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{dP}{d\theta} + \frac{(h_u - h_b)}{xcp_b} \left[\frac{dx}{d\theta} - (x - x^2) \frac{C}{w} \right] \quad (5.34)$$

$$\frac{dT_u}{d\theta} = -\frac{h_u A_u (T_u - T_w)}{cp_u wm(1-x)} + 0.1 \frac{v_u}{cp_u} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \frac{dP}{d\theta} \quad (5.35)$$

$$\frac{dm}{d\theta} = -\frac{Cm}{w} \quad (5.36)$$

$$\frac{dW}{d\theta} = P \frac{dV}{d\theta} \quad (5.37)$$

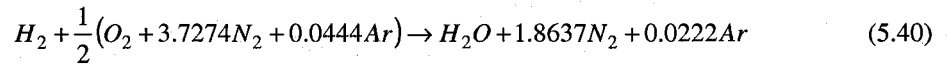
$$\frac{dQ_{lost}}{d\theta} = \frac{h_b A_b (T_b - T_w)}{w} + \frac{h_u A_u (T_u - T_w)}{w} \quad (5.38)$$

$$\frac{dH_{lost}}{d\theta} = \frac{Cm}{w} [(1 - x^2)h_u + x^2 h_b] \quad (5.39)$$

5.2 Équilibre chimique

Cette section traite du calcul des fractions molaires de chaque espèce du mélange en fonction de la température, de la pression et de la quantité de carburant. Ces valeurs permettront de calculer l'entropie, l'enthalpie et le volume spécifique des deux zones. À l'instant qui précède l'étincelle, nous connaissons la masse de chaque composant du mélange. Nous connaissons la masse d'air frais, la masse d'hydrogène et la masse des gaz résiduels ainsi que leur composition. Les ouvrages intéressants concernant ce sujet sont ceux de Winterbone [18], Turns [21] et Benson [29].

Réaction stœchiométrique : Voici la réaction stœchiométrique de l'hydrogène dans l'air :



Nous pouvons calculer la valeur du rapport carburant/air pour le cas stœchiométrique :

$$\left(\frac{F}{A} \right)_s = \frac{2(1.008)}{\frac{1}{2}(32 + 3.7274 * 28.013 + 0.0444 * 39.948)} = \frac{2.016}{69.095} = 2.917\% \langle \text{massique} \rangle \quad (5.41)$$

Ici, F est utilisé pour fuel. Dans la réalité, le mélange ne sera pas toujours stœchiométrique. Nous utiliserons ϕ (PHI) ou λ (LAMBDA) pour caractériser la richesse d'un mélange. Voici donc la valeur de ces deux variables :

$$\left(\frac{F}{A}\right)_{réel} = \frac{H_2}{Air} \langle \text{massique} \rangle \quad \phi = \frac{\left(\frac{F}{A}\right)_{réel}}{\left(\frac{F}{A}\right)_s} = \frac{1}{\lambda} \quad (5.42)$$

Réaction réelle : La réaction réelle quant à elle inclut beaucoup plus de produits. Ici, nous nous contenterons de ceux présentés dans la réaction suivante qui est une adaptation de Olikara et Borman [31] :

$$\phi H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.7274N_2 + 0.0444Ar) \Rightarrow \left[\begin{array}{l} x_1 H_2O + x_2 H_2 + x_3 OH + x_4 H + x_5 N_2 + x_6 NO \\ + x_7 N + x_8 O_2 + x_9 O + x_{10} Ar \end{array} \right] n_{total} \quad (5.43)$$

Ici, x_1 à x_{10} sont les fractions molaires des produits et n_{total} est le nombre de moles total de produit. Notez que d'autres espèces auraient pu être ajoutées dans les produits.

5.2.1 Présentation des équations utilisées

Dans ce cas, nous avons 11 inconnus, soit x_1 à x_{10} et le nombre de moles total des produits. Il nous faudra donc 11 équations pour pouvoir résoudre le problème. Avec la réaction réelle, nous avons quatre équations de la conservation des atomes [20], soit les équations 5.44 à 5.47.

$$H_{balance} : 2\phi = (2x_1 + 2x_2 + x_3 + x_4)n_{total} \quad (5.44)$$

$$O_{balance} : 1 = (x_1 + x_3 + x_6 + 2x_8 + x_9)n_{total} \quad (5.45)$$

$$N_{balance} : 3.7274 = (2x_5 + x_6 + x_7)n_{total} \quad (5.46)$$

$$Ar_{balance} : 0.0222 = (x_{10})n_{total} \quad (5.47)$$

Une autre équation provient de la contrainte sur le nombre de moles des produits :

$$\sum_{i=1}^{10} x_i = 1 \quad (5.48)$$

Avec quelques manipulations, il est possible d'éliminer x_{10} et d'obtenir les trois équations suivantes :

$$1.0222x_1 + x_2 + 1.0222x_3 + x_4 + x_5 + 1.0222x_6 + x_7 + 1.0444x_8 + 1.0222x_9 - 1 = 0 \quad (5.49)$$

$$(2\phi - 2)x_1 - 2x_2 + (2\phi - 1)x_3 - x_4 + 2\phi x_6 + 4\phi x_8 + 2\phi x_9 = 0 \quad (5.50)$$

$$3.7274x_1 + 3.7274x_3 - 2x_5 + 2.7274x_6 - x_7 + 7.4548x_8 + 3.7274x_9 = 0 \quad (5.51)$$

Puisque nous avons maintenant 9 inconnus, il nous faut six équations supplémentaires. Celles-ci seront fournies par la condition d'équilibre entre les produits. Voici donc les six réactions hypothétiques choisies, celles-ci sont celles utilisées par Horlock et Winterbone [19] et reprisent par Maher [33] pour une simulation d'un moteur fonctionnant à l'hydrogène.

$$\frac{1}{2}H_2 \Leftrightarrow H \dots \dots \dots K_{P1} = \frac{x_4}{x_2^{1/2}} P^{1/2} \quad (5.52)$$

$$\frac{1}{2}O_2 \Leftrightarrow O \dots \dots \dots K_{P2} = \frac{x_9}{x_8^{1/2}} P^{1/2} \quad (5.53)$$

$$\frac{1}{2}N_2 \Leftrightarrow N \dots\dots\dots K_{p3} = \frac{x_7}{x_5^{1/2}} P^{1/2} \quad (5.54)$$

$$2H_2O \Leftrightarrow 2H_2 + O_2 \dots\dots\dots K_{p4} = \frac{x_2^2 x_8}{x_1^2} P \quad (5.55)$$

$$H_2O \Leftrightarrow OH + \frac{1}{2}H_2 \dots\dots\dots K_{p5} = \frac{x_3 x_2^{1/2}}{x_1} P^{1/2} \quad (5.56)$$

$$H_2O + \frac{1}{2}N_2 \Leftrightarrow H_2 + NO \dots\dots\dots K_{p6} = \frac{x_2 x_6}{x_1 x_5^{1/2}} P^{1/2} \quad (5.57)$$

Ici, P est la pression en atmosphère. Nous avons donc un système de 9 équations et 9 inconnues. Pour le calcul des constantes Kp, la lecture des ouvrages 21 à 24 permet de bien comprendre l'utilité et la provenance de cette constante. La méthode de résolution du problème est présentée à l'appendice E et repose sur la méthode d'élimination de Gauss. La méthodologie provient de Olikara et Borman [31] et a été adaptée pour l'hydrogène, c'est pour cette raison qu'elle est présentée en appendice. Pour pouvoir effectuer ce calcul, il faut des valeurs de départ pour chaque constituant. Puisqu'au premier instant de la combustion, nous ne connaissons pas ces valeurs, nous devons les calculer.

5.2.2 Calcul des valeurs de départ

Le calcul des valeurs de départ est très simple. Pour les mélanges pauvres et riches, nous ne considérerons que les espèces majeures qui sont : H₂O, N₂, O₂ et H₂. À partir de ces valeurs et de la température, nous pourrions calculer les fractions molaires des espèces mineures avec les équations 5.52 à 5.57. Par la suite, l'utilisation de toutes ces valeurs dans les équations 5.49, 5.50 et 5.51 permettra de façon itérative, de déterminer les valeurs exactes des fractions molaires de chaque espèce. Voici le calcul des valeurs de départ selon le modèle majeur mineur :

$$\text{Pour } (\phi < 1) : \phi H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76N_2) \rightarrow \phi H_2O + \frac{1-\phi}{2}O_2 + 1.88N_2 \quad (5.58)$$

$$\text{Pour } (\phi > 1) : \phi H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76N_2) \rightarrow H_2O + (\phi - 1)H_2 + 1.88N_2 \quad (5.59)$$

Le tableau 1 présente la fraction molaire des espèces majeures en fonction du ratio ϕ pour le mélange riche et pauvre.

Tableau 1 : Calcul des valeurs de départ des espèces chimiques

Xi	$\phi < 1$ PAUVRE	$\phi > 1$ RICHE
x1 (H ₂ O)	$\phi / ((\phi + 1)/2 + 1.88)$	$1 / (\phi + 1.88)$
x5 (N ₂)	$1.88 / ((\phi + 1)/2 + 1.88)$	$1.88 / (\phi + 1.88)$
x8 (O ₂)	$((1 - \phi)/2) / ((\phi + 1)/2 + 1.88)$	0
x2 (H ₂)	0	$(\phi - 1) / (\phi + 1.88)$

Nous avons donc tout ce qu'il faut pour effectuer les calculs. Il ne reste qu'à exprimer les valeurs des fractions molaires de toutes les espèces en fonction de (x_1, x_5, x_8) pour le mélange pauvre et (x_1, x_2, x_5) pour le mélange riche.

5.2.3 Fraction molaire du mélange pauvre

Ici, nous devons exprimer la fraction molaire de chaque espèce en fonction de celles de H_2O , N_2 et O_2 , soit x_1 , x_5 et x_8 . Avec les équations 5.52 à 5.57 et les simplifications suivantes :

$$C_1 = \frac{Kp_1}{p^{1/2}}, C_2 = \frac{Kp_2}{p^{1/2}}, C_3 = \frac{Kp_3}{p^{1/2}}, C_4 = \frac{Kp_4^{1/2}}{p^{1/2}}, C_5 = \frac{Kp_5}{p^{1/2}}, C_6 = \frac{Kp_6}{p^{1/2}},$$

nous obtenons :

$$x_2 = C_4 \frac{x_1}{x_8^{1/2}} \quad (5.60)$$

$$x_3 = \frac{C_5}{C_4^{1/2}} x_1^{1/2} x_8^{1/4} \quad (5.61)$$

$$x_4 = C_1 C_4^{1/2} \frac{x_1^{1/2}}{x_8^{1/4}} \quad (5.62)$$

$$x_6 = \frac{C_6}{C_4} x_8^{1/2} x_5^{1/2} \quad (5.63)$$

$$x_7 = C_3 x_5^{1/2} \quad (5.64)$$

$$x_9 = C_2 x_8^{1/2} \quad (5.65)$$

5.2.4 Fraction molaire du mélange riche

Ici, nous devons exprimer la fraction molaire de chaque espèce en fonction de celles de H_2O , N_2 et H_2 , soit x_1 , x_2 et x_5 . Avec les équations 5.52 à 5.57, nous obtenons :

$$x_3 = C_5 \frac{x_1}{x_2^{1/2}} \quad (5.66)$$

$$x_4 = C_1 x_2^{1/2} \quad (5.67)$$

$$x_6 = C_6 \frac{x_1 x_5^{1/2}}{x_2} \quad (5.68)$$

$$x_7 = C_3 x_5^{1/2} \quad (5.69)$$

$$x_8 = \left(C_4 \frac{x_1}{x_2} \right)^2 \quad (5.70)$$

$$x_9 = C_2 C_4 \frac{x_1}{x_2} \quad (5.71)$$

5.3 Calcul de la vitesse de flamme

Le calcul de la vitesse de la flamme est sans doute le plus important de tous. La combustion repose entièrement sur cette valeur. La corrélation utilisée pour calculer la vitesse de propagation de flamme turbulente est celle de Fagelson [26].

$$S_T = A' \left[\frac{NDLP}{T_b^{1.67}} \right]^{0.4} T_b^{0.41} T_u^{1.25} \left[\frac{X_f F(\phi)}{\phi} \right]^{0.5} \frac{R}{E_a} \exp \left(-\frac{E_a}{2RT_b} \right) \quad (5.72)$$

T : Kelvin

N : rpm

D : diamètre du cylindre (cm)

L : course (cm)

P : atm

R : (1.987 cal/moleK) ou 8.3195 JmoleK⁻¹

Ea : énergie d'activation (20000 cal/mole) ou 83740 J/mole

Xf : fraction molaire de carburant initial

ϕ : PHI

$$F(\phi) = 1 - (1 - \beta) / \phi \quad \phi > 1$$

$$F(\phi) = 1 - \phi (1 - \beta) \quad \phi \leq 1$$

$$A' = 5000$$

$$\beta = RT_b / E_a$$

Connaissant cette vitesse, on peut calculer la variation de masse brûlée [9].

$$\frac{dM_b}{d\theta} = \frac{A_{fl} \rho S_T}{w} \quad (5.73)$$

$$\text{La variation de la fraction massique brûlée est : } \frac{dX}{d\theta} = \frac{dM_b}{dt} \frac{1}{M} \frac{dt}{d\theta} \quad (5.74)$$

$$\text{La fraction de masse brûlée est donc } X = M_b^{t-\Delta t} + \frac{dX}{d\theta} \quad (5.75)$$

5.4 Approche utilisée pour la modélisation de la combustion

Le modèle utilisé pour la combustion est un modèle deux zones, c'est-à-dire une zone brûlée et non brûlée qui sont séparées par le front de propagation de la flamme. Dans un tel type de modèle, il est acceptable de supposer que la pression est uniforme dans le cylindre. Cependant, les températures sont différentes dans les deux zones. Pour la résolution des équations différentielles, la méthode numérique de Runge Kutta d'ordre cinq est utilisée. Pour la période de combustion, un pas de 0.01 degré est utilisé tandis que pour l'expansion, un pas de 0.1 degré suffit. L'ordinogramme de la figure 5-1 représente le schéma principal du module de combustion. Afin de donner une bonne idée au lecteur de certaines tâches effectuées dans la partie combustion, les modules Visual Basic FlameTemp.bas et ECP.bas sont développés en détail. Le module FlameTemp.bas calcule la valeur de départ de la température des gaz brûlés. Il s'agit tout simplement du calcul de la température de flamme adiabatique pour un mélange air-H₂ avec dissociation. Ce module permettra de voir l'intervention de différents autres modules qui sont aussi sollicités tout au long de la période de combustion. Le module ECP.bas (Equilibrium Combustion Product) calcule les constantes thermodynamiques des gaz brûlés selon les conditions d'équilibre. Noter que le calcul des NO_x est présenté en appendice G.

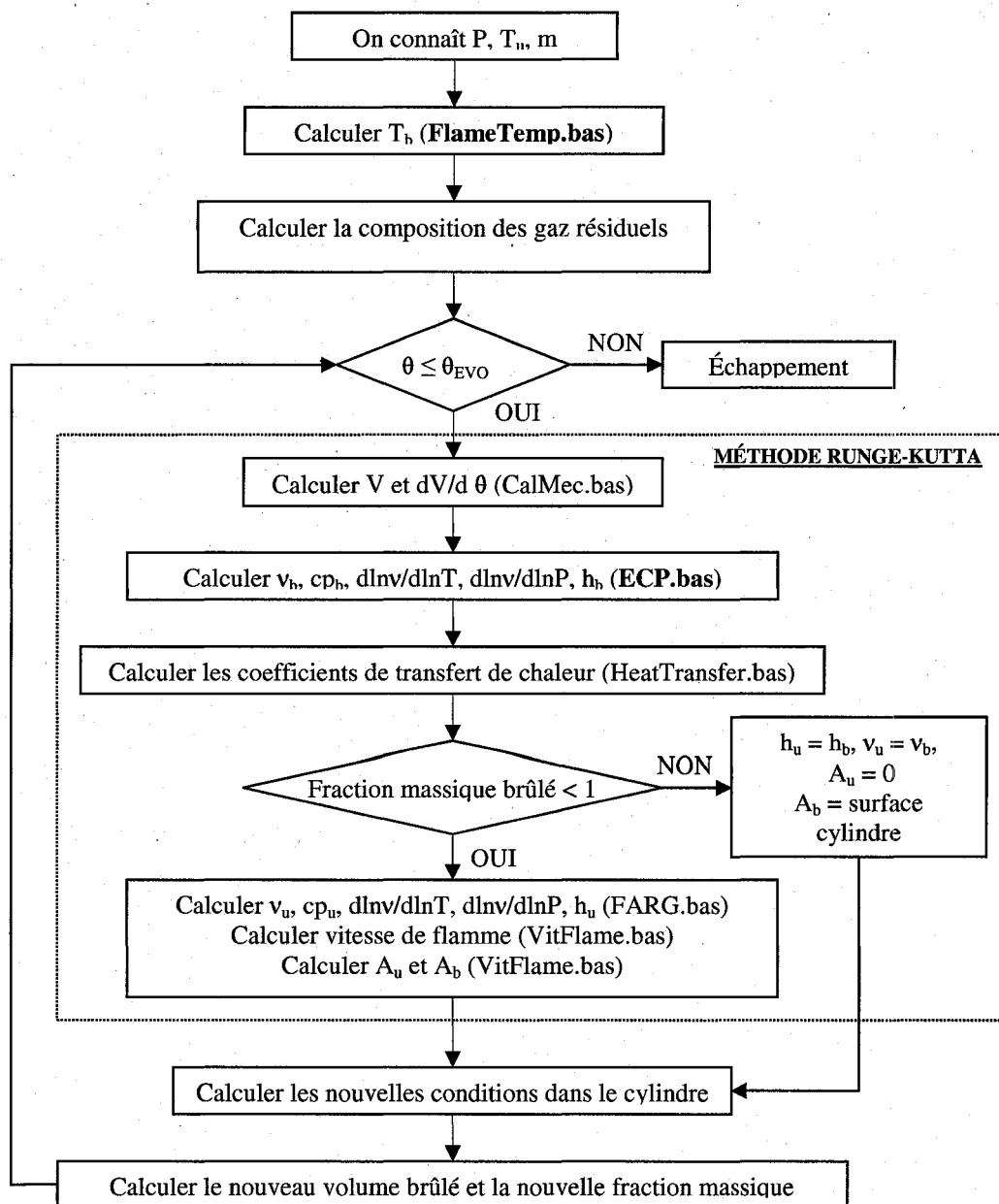


Figure 5-1 : Ordinogramme du module principal de la combustion

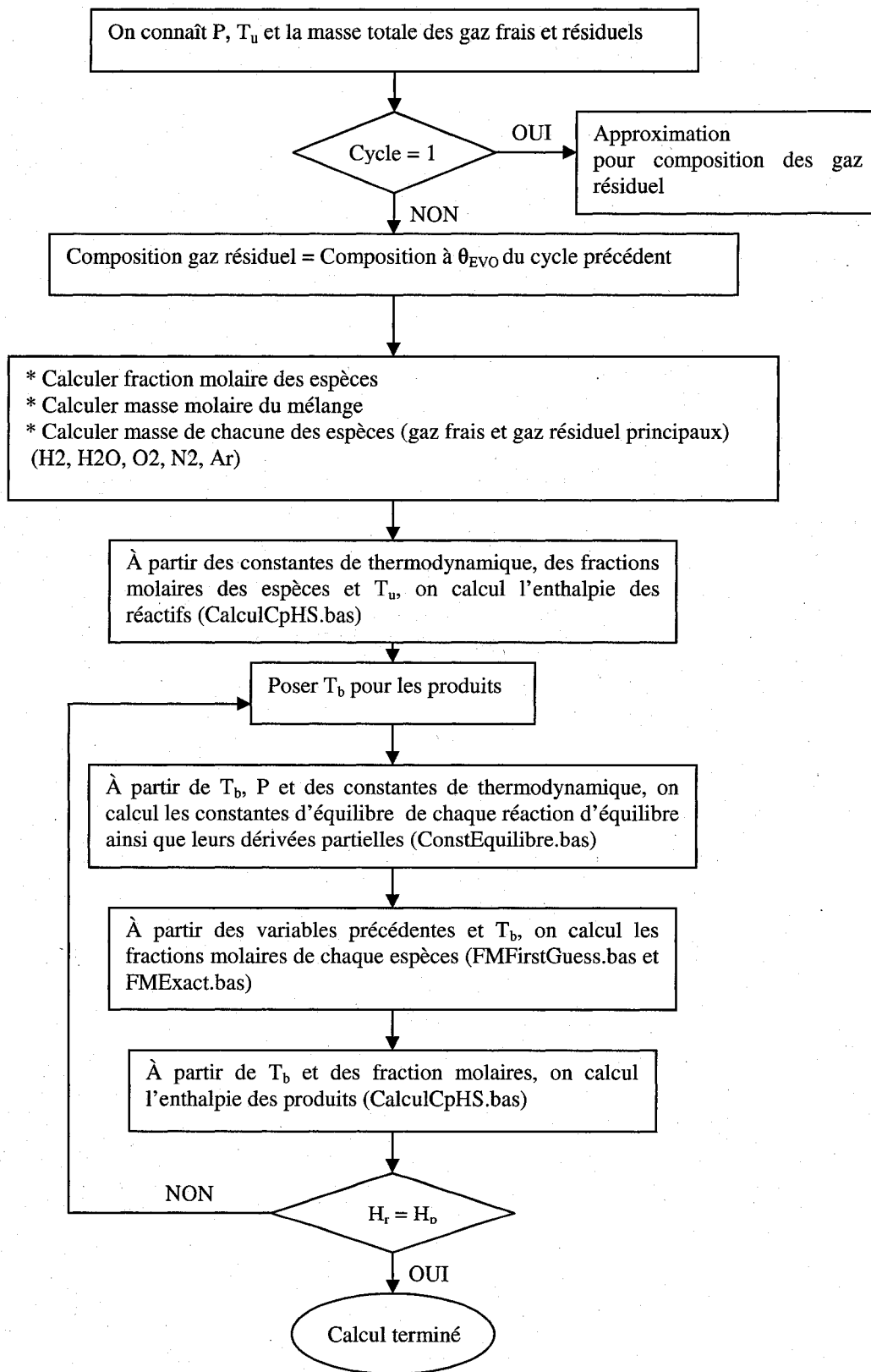


Figure 5-2 : Ordinoigramme du module de calcul de la température adiabatique de flamme

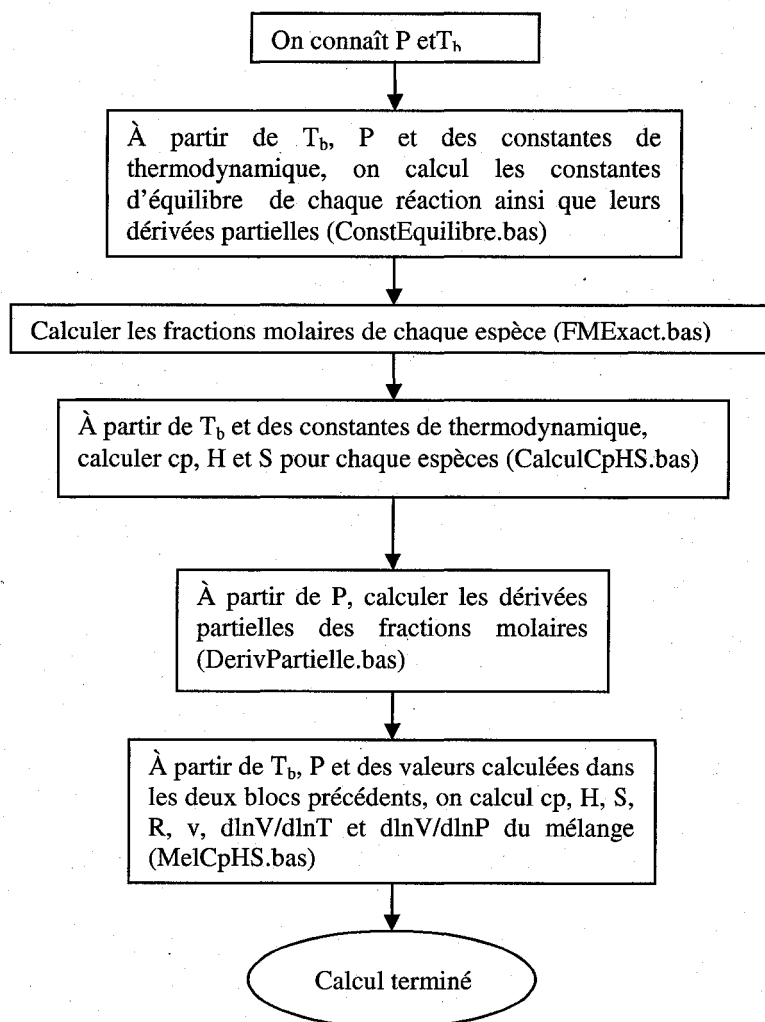


Figure 5-3 : Ordinogramme du module ECP.bas

6 RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX ET COMPARAISON

AVEC LA SIMULATION

6.1 Introduction

Cette partie contient les résultats reliés aux simulations numériques et aux tests sur banc d'essai. En premier lieu seront présentés les résultats purement numériques. Ces derniers n'ont donc pas été optimisés pour correspondre à des valeurs expérimentales. Les valeurs présentées concernent le moteur modifié uniquement. En second lieu, une brève validation du modèle numérique sera présentée. Cette partie contient donc des résultats numériques optimisés pour correspondre aux valeurs expérimentales. Puisque les données recueillies sont limitées étant donné le manque d'équipement sur le banc d'essai, la validation numérique sera donc limitée. Une troisième section comparera les résultats expérimentaux pour le moteur modifié et non modifié. Cette section constitue le principal objectif de ce projet de maîtrise. Une brève section concernant l'injection d'eau sera présentée à la fin du chapitre. Ces résultats pourront être utilisés pour justifier de futurs travaux. Avant de commencer la présentation des résultats, la section 6.2 présentera l'approche expérimentale.

6.2 Dispositifs expérimentaux

Cette partie présente les équipements disponibles au moment des essais.

- **Mesure du débit d'air**

Le débitmètre d'air du dynamomètre était défectueux au moment des tests. Il s'agissait d'un capteur à hélice inséré dans un cône comportant un grillage en nid d'abeille. Afin d'avoir des résultats qualitatifs, nous avons utilisé un capteur à fil chaud « Digital air velocity meter Kurtz serie 1440 » que nous avons installé dans le cône du capteur à hélice. Cet instrument et la façon dont il est installé permettront seulement de comparer les résultats entre le moteur modifié et non modifié. Nous pouvons comparer les deux moteurs pour un régime donné, mais sans plus.

- **Mesure des températures**

Un capteur de température est présent dans la tubulure d'échappement, après la jonction des quatre cylindres. Si un cylindre est défectueux, il est donc impossible de le détecter par sa température d'échappement étant donné l'arrangement. Il serait donc souhaitable d'avoir dans le futur un capteur de température à la sortie de chaque cylindre ou, préférablement, dans chaque cylindre.

- **Mesure de la richesse du mélange et NOx**

La mesure des polluants NOx est réalisée en utilisant un appareil à cinq gaz. Il s'agit d'un MicroGas OTC. Il faut mentionner ici qu'il a un temps de réponse relativement long. En effet, suite à un changement de

régime du moteur, il faut compter environ 30 secondes avant que la lecture des NOx se stabilise. La mesure de la richesse du mélange se fait aussi par l'utilisation du MicroGas. La valeur mesurée est celle du pourcentage d'oxygène contenu dans les gaz d'échappement. Celle-ci permet de calculer directement la valeur de ϕ .

- **Mesure de la puissance et du couple**

Le dynamomètre utilisé est un Superflow SF-742.

- **Système d'injection d'eau**

Nous avons conçu un système d'injection qui permet d'injecter une quantité d'eau variable de façon assez précise. Le système comporte trois buses de diamètre différent qui ensemble permettent des débits variables. La pression du système est fournie par la ligne d'air comprimé et varie de 0 à 100 psi par l'entremise d'un régulateur, ceci permet d'ajuster davantage les débits d'eau. Le système est contrôlé par trois solénoïdes. L'utilisateur doit donc connaître les débits de chaque buse et les combinaisons de ces dernières.

6.2.1 Déroulement des tests

La quantité d'hydrogène disponible pour les tests est relativement faible, c'est-à-dire qu'une cellule de six bouteilles permet un fonctionnement d'environ une demi-heure, selon le régime de fonctionnement du moteur. Il faut aussi laisser au moteur le temps de se réchauffer, ce qui consomme aussi une certaine quantité d'hydrogène. Le temps de réaction du capteur de NOx contribue aussi de façon importante à la consommation d'hydrogène. Les réserves d'hydrogène sont la principale variable qui influence l'orientation des tests. Les données relevées concernent donc le fonctionnement à puissance maximale. La première chose qui est mesurée est la valeur maximale de ϕ à laquelle le moteur modifié peut fonctionner sans problème de retour de flamme pour la plage de 1000 à 4000 rpm. C'est cette valeur qui permettra de valider l'efficacité des modifications apportées au moteur. Pour cette valeur maximale de ϕ , on note bien sûr la valeur du couple et de la puissance maximale. La valeur des NOx correspondante est aussi mesurée, celle-ci permettra de savoir si les modifications apportées augmentent ou diminuent les émissions polluantes. L'injection d'eau sera appliquée au moteur non modifié afin de vérifier son impact sur les problèmes de retour de flamme ainsi que sur la production de NOx. Il s'agit d'essai préliminaire servant avant tout à justifier de futurs travaux qui pourraient être entrepris dans cette voie. L'avance à l'allumage est l'avance pour couple maximal.

6.3 Résultats numériques

Cette section présente les résultats concernant le moteur modifié, tel que présenté à la section 2.3. Ces résultats concernent principalement les performances, efficacité, émissions des NOx, pression et température maximale de combustion. Mentionnons ici que le modèle ne tient pas compte des problèmes de

préallumage. Les résultats sont donc présentés pour des valeurs de ϕ allant jusqu'à 1.2, ce qui sera impossible de réaliser dans l'expérimentation.

6.3.1 Résultats généraux

Les résultats suivants sont les résultats concernant la simulation du moteur modifié uniquement. L'avance à l'allumage est fixée à 0 degré sauf pour les mélanges très pauvres en hydrogène. Dans ces cas, la vitesse de flamme est faible et donc la durée de combustion est grande comparativement au mélange riche. Les résultats présentés ne sont donc pas les valeurs maximales. Puisque la vitesse de flamme de l'hydrogène est très élevée comparativement à l'essence [23], l'impact de l'avance à l'allumage est moins important (basé sur les mesures sur le banc d'essai) et donc, les écarts entre les résultats pour l'avance optimale et l'allumage au TDC sont faibles. Ce choix est bien sûr pour accélérer les simulations puisque l'avance optimale doit être déterminée par l'utilisateur et varie selon le rpm et la valeur de ϕ .

On peut voir, sur le graphique de la puissance de la figure 6-1, que le moteur à hydrogène modifié est peu performant. La puissance maximale à 4000 rpm est inférieure à 60 c.v. et celle-ci ne tient pas compte des problèmes de retour de flamme. En tenant compte des problèmes de préallumage, il faudrait plutôt utiliser une valeur de ϕ de 0.5 comme référence pour les performances. Dans ce cas, le moteur produirait environ 30 c.v.. Ces performances médiocres s'expliquent en partie par la baisse importante du rendement volumétrique du moteur, tel que présenté à la figure 6-1. On peut voir que le rendement volumétrique est faible à haut régime. Ici, le rendement volumétrique tient aussi compte du temps d'injection tel que discuté en 4.5.6.

Une des valeurs les plus intéressantes à analyser est l'efficacité du moteur. L'efficacité thermique du moteur est maximale pour les faibles valeurs de ϕ . Dans ces cas, les températures de combustion sont basses, ce qui entraîne une diminution des pertes de chaleur, qui, sont proportionnelles à l'écart de température entre les gaz et les parois du cylindre. Puisque la température des parois est une valeur constante, nous pouvons nous attendre à surévaluer l'efficacité thermique pour les petites valeurs de ϕ et la sous-évaluer pour les grandes valeurs de ϕ . En effet, la diminution des températures de combustion devrait aussi entraîner une diminution des températures des parois. Une augmentation des températures devrait donc entraîner une augmentation des températures des parois. L'efficacité thermique varie selon la vitesse de rotation du moteur. Le rendement est donc meilleur pour les vitesses de rotation élevées puisque les temps d'expositions entre les gaz et les parois sont moins importants.

Pour ce qui est de l'efficacité mécanique, nous pouvons constater qu'elle est très faible pour les petites valeurs de ϕ . Puisque les pertes de puissances en friction sont constantes pour un rpm donné, nous pouvons comprendre pourquoi l'efficacité mécanique est si faible pour les mélanges pauvres. Les pertes en friction augmentent avec le rpm, il est normal de constater une diminution en fonction de l'augmentation du

régime du moteur. La grande plage d'inflammabilité de l'hydrogène explique ces grandes fluctuations dans les valeurs de l'efficacité mécanique. Contrairement à l'essence dont la plage d'inflammabilité est très restreinte [23], l'hydrogène peut être brûlé dans des proportions allant de 4 à 75 %. La puissance disponible dans le mélange peut donc varier beaucoup. La valeur minimale de ϕ à laquelle peut fonctionner un moteur est donc la valeur minimale permettant de contrer les forces de friction.

L'efficacité globale du moteur atteint un maximum de 28.5 % à 2000 rpm. Il faut mentionner ici que les modifications au moteur ont entraîné une diminution de son efficacité mécanique. Ceci est dû à la diminution de la puissance disponible causée par la baisse du rendement volumétrique. Les pertes en friction étant les mêmes, il s'en suit une baisse d'efficacité mécanique. La section 6.3.4 présentera des résultats à ce sujet.

Pour ce qui est des émissions polluantes, ils suivent la tendance observée par BMW [13] et Khajuria [27]. Les émissions atteignent un sommet pour une valeur de ϕ situé entre 0.9 et 1. Pour des valeurs de ϕ inférieur à 0.5, les émissions de NOx sont presque nulles. Le maximum d'émission se situe entre 2500 et 4000 ppm. L'augmentation du rpm entraîne une diminution des émissions de NOx car le temps de réaction diminue [17]. La principale variable qui influence la formation des NOx est la température maximale de combustion. Nous constatons que pour des températures inférieures à 2000 K, les émissions de NOx sont très faibles. La pression joue aussi un rôle important dans la production des NOx. En effet, le calcul des constantes d'équilibre K_p est dépendant de la pression. Son impact sera observé dans la section 6.3.3 qui traite de l'avance à l'allumage.

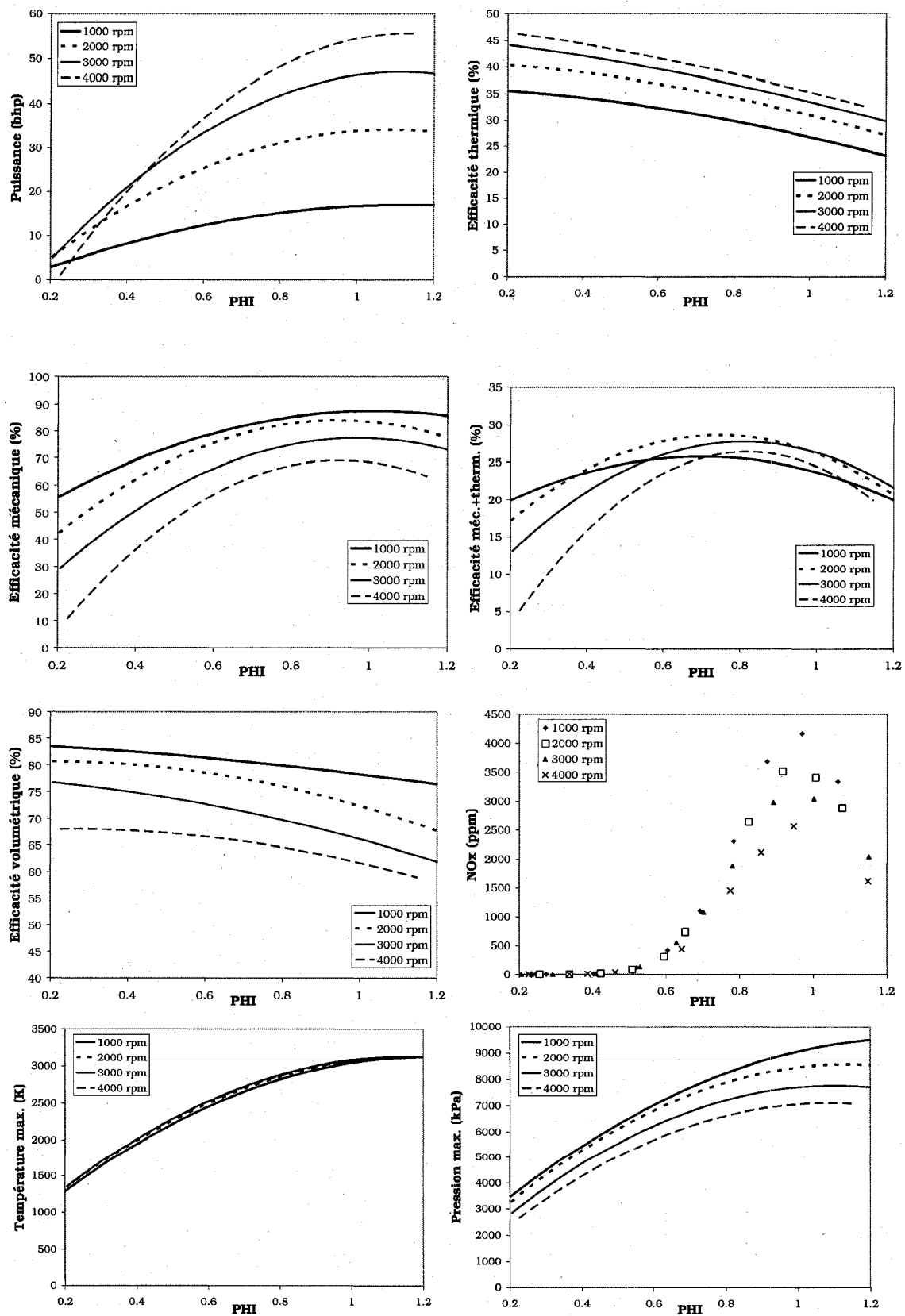


Figure 6-1 : Résultats globaux des simulations

6.3.2 Effet de l'injection d'eau

L'injection d'eau dans la chambre de combustion a pour effet de diminuer la température de combustion maximale. Malheureusement, la simulation de cet ajout est limitée à la prédiction des émissions polluantes. En effet, l'impact de l'eau sur les performances est très négatif. Pour une quantité d'eau de 12 % massique, la puissance chute de moitié, ce qui n'est pas le cas dans la réalité. Cependant, la prédiction des émissions de NOx semble plus réaliste, même si dans cette section, aucune comparaison n'est réalisée avec les résultats du banc d'essai. La présence d'eau lors de la combustion entraîne une augmentation de la pression causée par l'évaporation de l'eau. Ce phénomène n'est pas modélisé dans le présent logiciel. Puisque la simulation de l'injection d'eau n'était pas un objectif de recherche, nous nous limiterons à ces explications. La figure 6-2 présente les émissions des NOx en fonction du pourcentage d'eau massique injecté dans le cylindre.

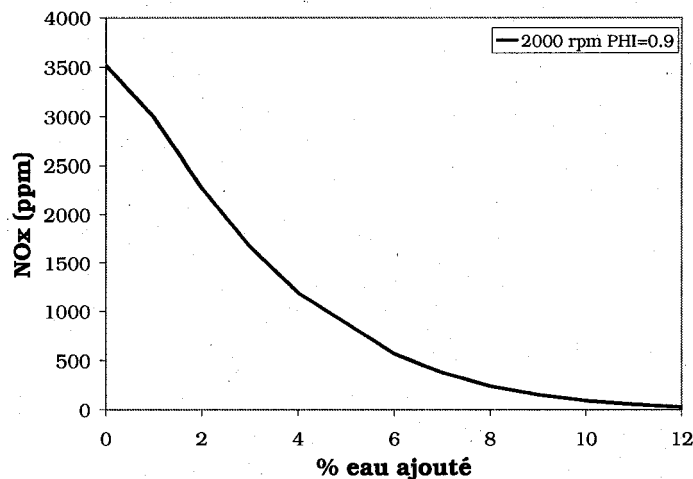


Figure 6-2 : Effet de l'injection d'eau sur les émissions de NOx

Nous observons une baisse importante des émissions des NOx en fonction de la quantité d'eau injectée. Avec ce graphique uniquement, nous pouvons prétendre que l'utilisation de l'injection d'eau pourrait être une solution très intéressante pour diminuer les émissions des NOx des moteurs à hydrogène. Il faut mentionner que l'injection d'eau a aussi un impact important sur les problèmes de pré allumage tel que mentionné en 2.2.1.

6.3.3 Effet de l'avance à l'allumage

Tel que mentionné à la section 6.3.1, l'avance à l'allumage a un effet sur les résultats [54]. Les résultats de la figure 6-3 ont été réalisés pour un régime de 2000 rpm et des valeurs de phi de 0.4 et 0.8. Une valeur négative signifie une avance et une valeur positive signifie un retard à l'allumage. En observant les graphiques, nous pouvons constater que l'avance optimale est différente pour les deux valeurs de phi. Pour ce qui concerne la puissance maximale, nous remarquons que l'avance optimale est de -10 degrés pour une

valeur de ϕ de 0.8. Pour une valeur de ϕ de 0.4, l'avance a peu d'influence sur la puissance et l'efficacité globale entre -10 et 10. Nous pouvons aussi observer que les avances et retard excessifs entraînent des baisses de performances importantes.

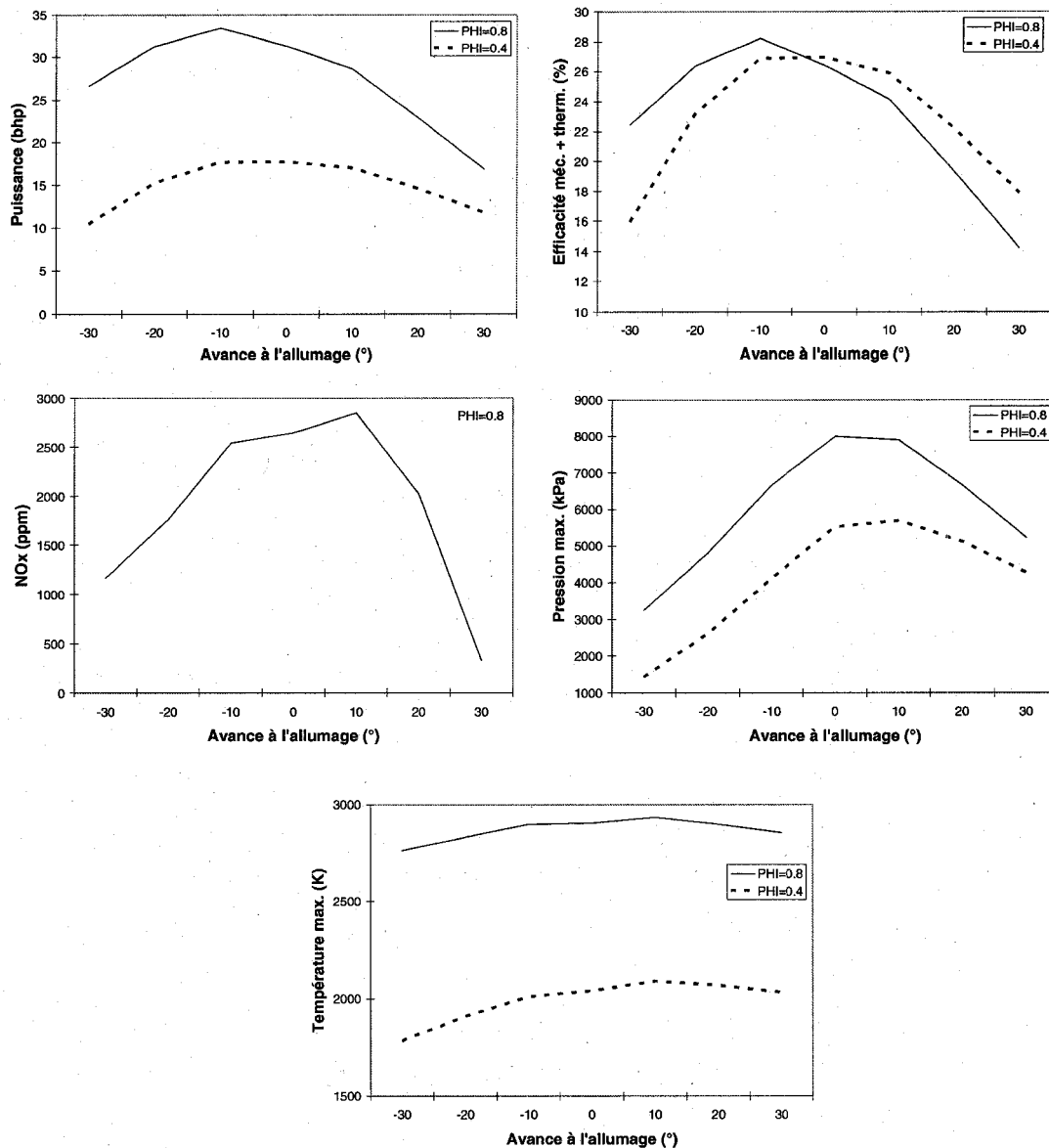


Figure 6-3 : Effet de l'avance à l'allumage

L'effet sur les émissions des NOx semble cependant être bénéfique. Comme mentionné plus haut, la pression, et surtout la température ont un rôle important à jouer dans la formation des NOx. Les graphiques de pression et température nous permettent de bien voir l'impact de la pression sur la formation des NOx. Le temps disponible à la réaction pour la formation des NOx est aussi affecté par l'avance à l'allumage. Nous pouvons constater sur les graphiques de P et T que les conditions pour un retard de 30 degrés devraient entraîner des émissions des NOx supérieures à ceux pour une avance de 30 degrés. Cependant, nous observons sur le graphique des NOx que ce n'est pas le cas. Les émissions des NOx sont inférieures

pour un retard de 30 degrés malgré une température et une pression plus élevée que dans le cas d'une avance de 30 degrés. Puisque la réaction est écourtée de 60 degrés, il est donc probable que ceci explique l'allure de la courbe des NOx.

6.3.4 Effet de l'ajout d'un turbo

Comme nous avons pu le constater à la section 6.3.1, le moteur à hydrogène a une bonne efficacité globale. Malheureusement, pour les valeurs de ϕ entraînant une bonne efficacité thermique, l'efficacité mécanique est très faible. Aussi, nous avons vu que pour les valeurs de ϕ inférieures à 0.5, les émissions de NOx sont très faibles. La solution idéale pour augmenter l'efficacité mécanique du moteur sans pour autant diminuer son efficacité thermique serait d'ajouter un compresseur. En utilisant une valeur de ϕ de 0.5, le moteur pourrait être à la fois performant, efficace et non polluant. En guise de comparaison, les graphiques de la figure 6-4 présentent différentes valeurs concernant le moteur modifié, avec et sans turbo, ainsi que des valeurs concernant le moteur d'origine ayant deux soupapes d'admission d'air avec un turbo. Dans ce cas, pour ce qui est de l'injection, elle est de type direct et débute après la fermeture des soupapes d'admission.

En observant le graphique de l'efficacité volumétrique, nous pouvons penser que l'écoulement est souvent étranglé au niveau de la soupape pour le cas du moteur modifié. L'ajout d'un turbocompresseur ne semble donc pas compenser la baisse d'efficacité volumétrique causée par l'élimination d'une soupape d'admission d'air. Dans ce cas, il est donc intéressant de voir les résultats de l'ajout d'un compresseur au moteur d'origine. Le rendement mécanique sera supérieur au moteur modifié. En effet, nous pouvons observer sur le graphique du rendement mécanique, qu'il est supérieur pour le moteur d'origine. L'augmentation du rendement volumétrique entraîne bien sûr une augmentation de la puissance disponible, comme le démontre le graphique de la puissance de la figure 6-4. Pour ce qui est du rendement thermique, il est pratiquement constant. Le rendement global du moteur atteint près de 35 % avec un turbo. Ces résultats sont comparables au 38 % annoncé par Ford pour son modèle U à l'hydrogène [4]. Les émissions de NOx pour la plage de 1000 à 4000 rpm se situent en dessous de 150 ppm.

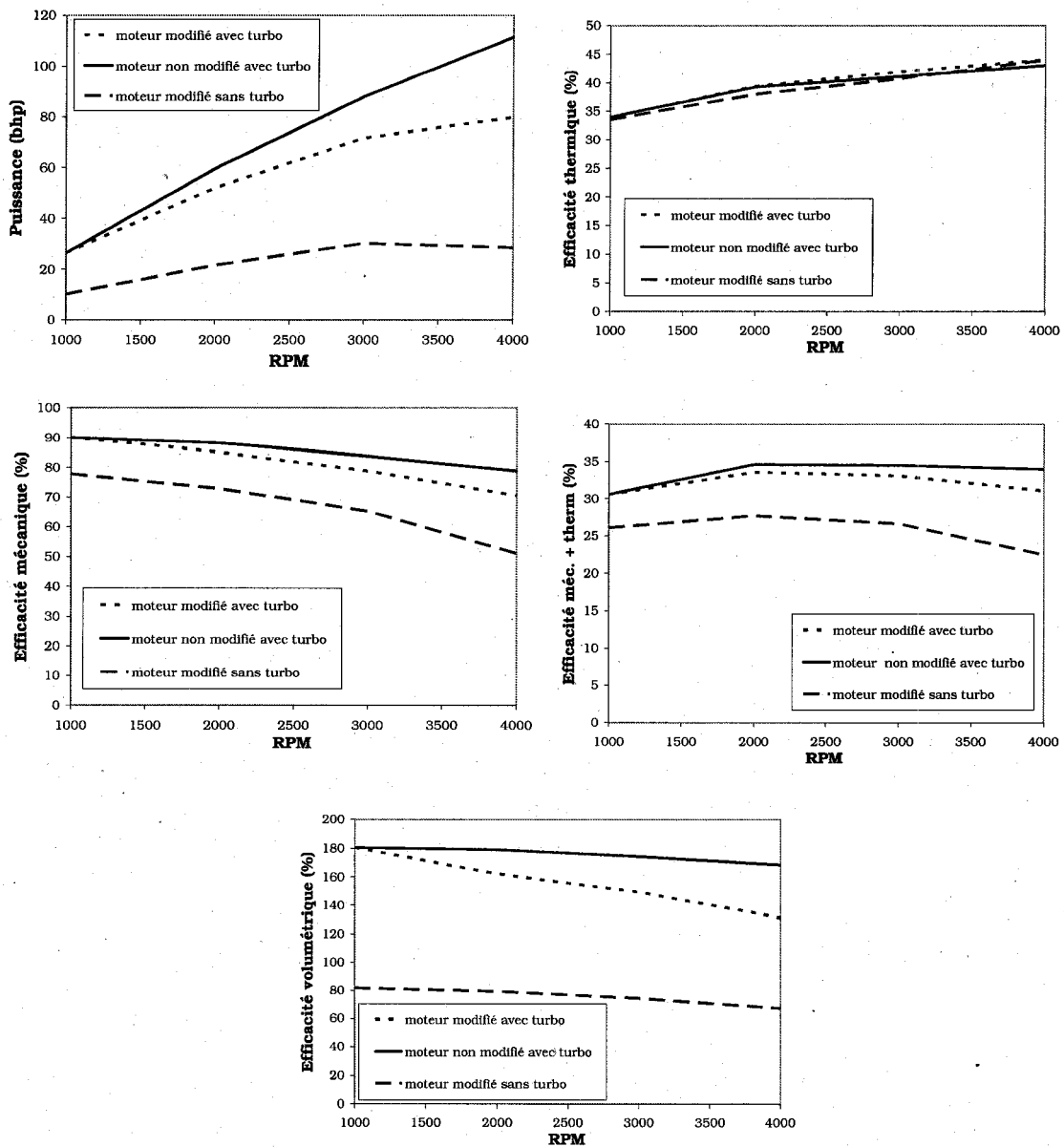


Figure 6-4 : Effet de l'ajout d'un compresseur

6.4 Validation du modèle

La figure 6-5 montre une comparaison entre les résultats prédits par le logiciel Ricardo Wave (www.ricardo.com) de l'ETS (simulation effectuée par Jean Robert Desmeules) et le modèle numérique développé dans le cadre de ce projet de maîtrise pour le moteur modifié. Puisque nous ne connaissons pas la valeur expérimentale exacte du rendement volumétrique, aucun ajustement ne sera apporté au modèle.

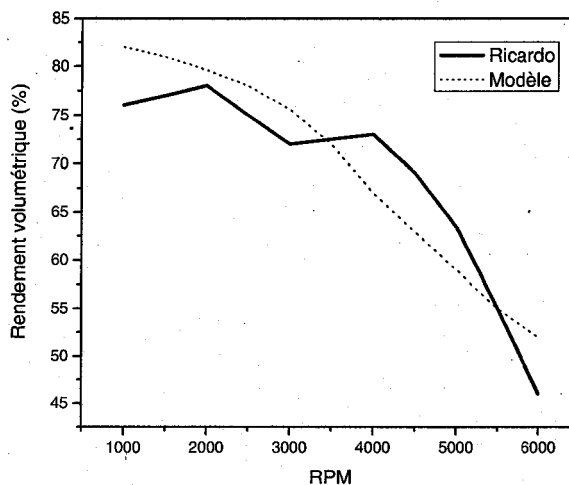


Figure 6-5 : Validation de rendement volumétrique

Les hypothèses émises pour la simulation de l'admission sont la cause de ces écarts. Comme nous le verrons à l'appendice C, la prédiction du rendement volumétrique dépend de plusieurs facteurs et son calcul est donc très complexe. Les valeurs utilisées pour la simulation sont celles présentées au chapitre quatre. À la vue de ces résultats, le coefficient de décharge présenté à la section 4.5.3 ne sera pas utilisé.

La courbe de la puissance quant à elle colle relativement bien à l'expérimentation. Comme nous pouvons le voir sur la figure 6-6, les résultats semblent être en accord. Il aurait été primordial de connaître l'évolution de la pression dans le cylindre en fonction de la position du vilebrequin afin de pouvoir poser un diagnostic sur le modèle numérique.

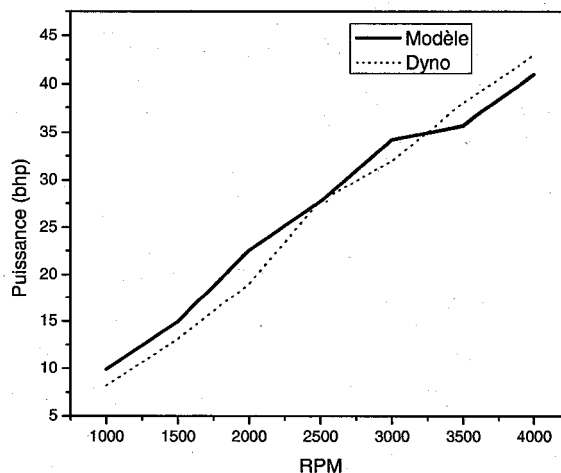


Figure 6-6 : Validation des performances

Donc, encore une fois, aucun ajustement n'a pu être apporté au modèle. Le rendement volumétrique ne pourrait expliquer à lui seul les écarts entre la théorie et l'expérience. Une quantité énorme de facteurs influence les calculs, surtout pour la modélisation de la combustion. Par exemple, la vitesse de la flamme et les pertes de chaleur au moteur ne sont pas connues sur le moteur qui fait l'objet des essais. Nous devons donc dans ce cas faire confiance à la théorie. Le manque de données expérimentales empêche l'identification des sources d'erreurs possibles.

6.5 Comparaison des résultats expérimentaux

La présente section compare les résultats expérimentaux concernant les deux configurations du moteur utilisé. La simulation a permis la comparaison des deux moteurs pour les principaux paramètres de fonctionnement tels la puissance, le couple ainsi que l'efficacité volumétrique et thermique. Nous étudierons ici les paramètres que nos mesures rendent possibles. Aucun lien n'est fait avec les simulations numériques. Les résultats permettront de vérifier si les modifications apportées au moteur ont amélioré son fonctionnement.

6.5.1 Présentation des résultats expérimentaux

La base des comparaisons sera le rapport stoechiométrique qui dans les deux cas, sera le même. La valeur de ϕ utilisé est la valeur limite permettant le fonctionnement du moteur modifié. C'est-à-dire que pour cette valeur, le moteur modifié fonctionne bien malgré la présence de retour de flamme très occasionnelle. Il faut noter ici que le moteur non modifié fonctionne très bien à ces valeurs de ϕ . D'ailleurs, il peut fonctionner avec des valeurs de 0.55 sans problème de préallumage. Or, pour ces valeurs les émissions de NOx commencent à être importantes. La figure 6-7 représente les valeurs de ϕ maximales :

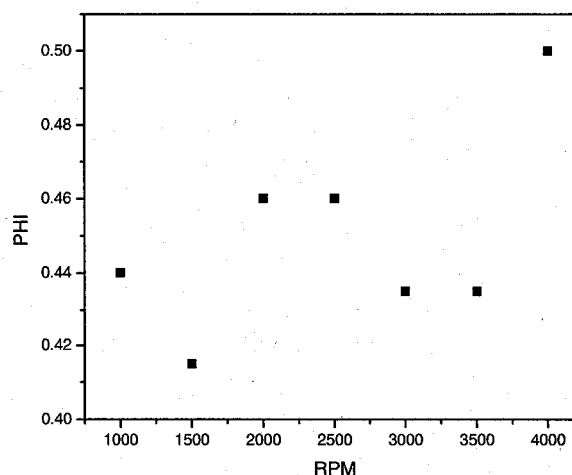


Figure 6-7 : Phi maximum du moteur modifié

Comme nous pouvons le voir, il est impossible de fonctionner avec un mélange riche. L'impact des modifications sur la quantité d'air admise dans le moteur est aussi très intéressant. Bien que nous ne disposions pas d'équipement capable de mesurer la valeur exacte du débit d'air, il a été possible quand même d'établir une comparaison. Notez que les figures 6-8 à 6-11 correspondent aux résultats présentés dans la figure 6-7. Comme l'indique la figure 6-8, l'écoulement a été grandement affecté suite aux modifications apportées au moteur.

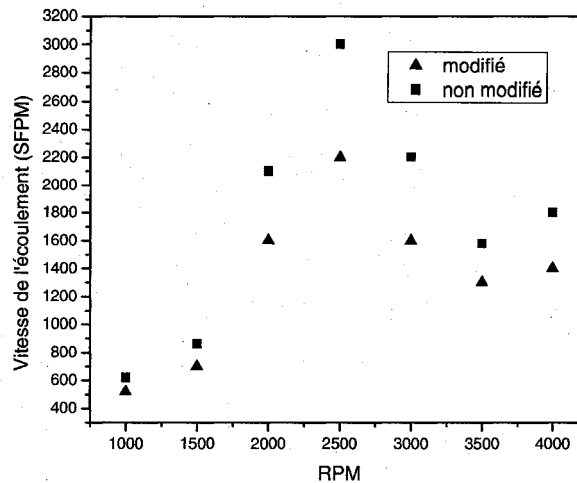


Figure 6-8 : Comparaison de l'écoulement

Le graphique de la figure 6-8 ne doit pas être utilisé autrement que pour comparer l'écoulement d'air pour un rpm donné. Les capteurs de vitesse à fils chaud doivent être utilisés dans un écoulement laminaire [55], ce qui n'est pas le cas ici. Le mouvement de va et viens du piston et la présence de « reverse flow [9] » dans un moteur conduit à la formation d'un écoulement pulsé [9]. Un montage muni d'un réservoir tampon devrait permettre d'atténuer cet effet. Le capteur de vitesse est donc utilisé de façon inadéquate. Les résultats de la figure 6-9 le confirment puisque la puissance augmente continuellement entre 1000 et 4000 rpm, contrairement à la vitesse de l'écoulement. Malgré tout, on peut conclure qu'à tous les régimes, le moteur modifié montre une baisse de son rendement volumétrique. Les deux figures qui suivent, soit 6-9 et 6-10, montrent les performances des deux moteurs.

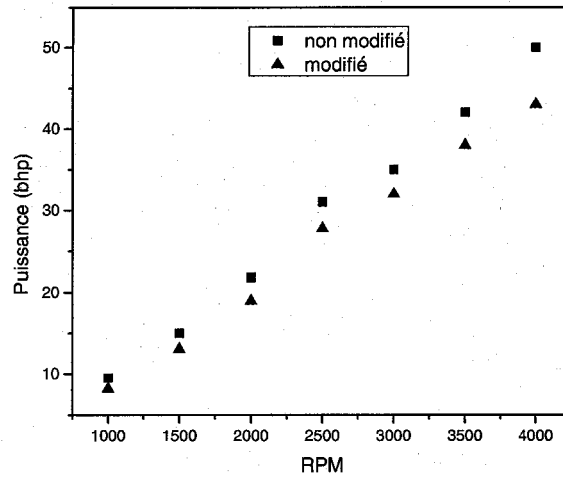


Figure 6-9 : Puissance vs rpm

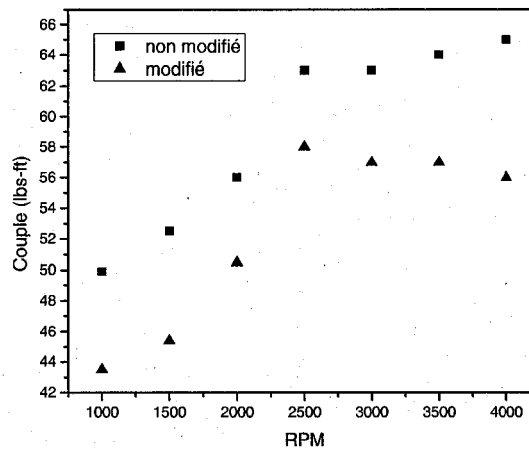


Figure 6-10 : Couple vs rpm

Les valeurs les plus intéressantes dans cette comparaison sont sans aucun doute les émissions des NOx. Nous voyons sur la figure 6-11, une différence énorme. Le moteur modifié émet de 4 à 16 fois plus d'oxyde d'azote.

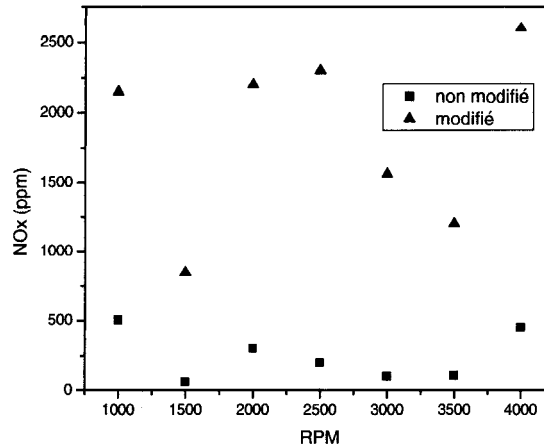


Figure 6-11 : Émissions polluantes

Pour expliquer cette différence énorme dans l'émission des NOx et le mauvais fonctionnement du moteur pour des mélanges pauvres, nous devons nous pencher sur le mélange air-hydrogène. Avec le mode d'injection choisi, il semble être impossible de créer un mélange homogène entre l'air et le carburant. Dans l'injection indirecte, où le carburant est injecté directement dans l'écoulement de l'air qui entre dans le cylindre, nous injectons l'hydrogène de façon très semblable à l'injection directe. De cette façon, on ne favorise pas le mélange entre les deux fluides et cela contribue à la formation d'un mélange non homogène. En effet, des études Hermann [25] ont montré que les mélanges non homogènes entraînent des émissions polluantes plus élevées que les mélanges homogènes. Comme on peut le voir sur la figure 6-12, le mode d'injection empêche la formation d'un mélange de qualité.

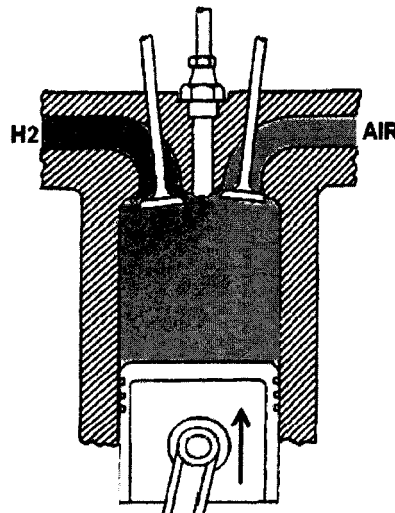


Figure 6-12 : Schéma de l'injection d'hydrogène et admission d'air

Il ne faut d'ailleurs pas oublier que des modifications ont aussi été apportées à la tubulure d'admission. L'écoulement a donc pu être perturbé et du même coup avoir entraîné une réduction de l'intensité de la

turbulence à l'intérieur du cylindre. Le fait d'éliminer une soupape pour l'admission d'air peut avoir aussi contribué à diminuer les tourbillons que provoque normalement l'admission. De plus, comme nous pouvons l'observer, le mélange sera riche localement. Même si la quantité d'hydrogène injecté est faible, elle est mal mélangée à l'air et tend donc à s'accumuler dans la partie supérieure du cylindre. La rencontre d'un point chaud peut donc facilement entraîner le pré allumage. Nous voyons donc que la turbulence dans le cylindre joue un rôle de premier plan dans le fonctionnement efficace du moteur.

Pour un moteur à injection indirecte, retarder l'injection permet à l'air de refroidir les points chauds davantage avant l'arrivée du carburant. Dans le cas du moteur modifié, on ne semble pas pouvoir profiter de ce phénomène, car la richesse locale du mélange a des conséquences désastreuses qu'il semble être impossible d'atténuer. Les modifications apportées sont donc moins efficaces que le simple fait de retarder l'injection dans un moteur à injection indirecte conventionnel. De tels résultats laissent envisager les mêmes problèmes pour les systèmes à injection directe d'hydrogène. De plus, même si l'injection directe permet d'éliminer les retours de flamme, cette technologie n'éliminera pas nécessairement le pré allumage.

Ces modifications avaient aussi un autre but. On pensait au départ pouvoir injecter de l'hydrogène une fois la soupape d'air fermée. De cette façon, nous pensions pouvoir contrer le problème de la faible densité de l'hydrogène. Nous avons vu, au chapitre cinq, que le pourcentage massique occupé par l'hydrogène dans un mélange stoechiométrique est de 2.9%. Or, en pourcentage volumique, cela représente 30%. C'est donc dire que l'hydrogène chasse une grande quantité d'air et du même coup entraîne une importante baisse des performances. Comme mentionnée à la section 1.3.1.2, l'injection directe permet de contrer ce problème. Nous pensions donc contrer ce problème avec l'admission séparée, mais il en est tout autrement. D'abord, l'élimination d'une soupape d'admission d'air a un impact très négatif sur le rendement volumétrique du moteur. Donc, en partant, nous laissons entrer beaucoup moins d'air dans le moteur, ce qui se traduit par les baisses de performances montrées plus haut. Aussi, les problèmes de préallumage ont été amplifiés de telle sorte que nous ne pouvons bénéficier d'aucun avantage, et ce, à tous les points de vue.

6.5.2 Injection d'eau

Cette section présente quelques résultats concernant l'injection d'eau. Suite à l'observation des résultats concernant les émissions des NOx, une étude préliminaire de l'ajout d'eau dans le moteur semble pertinente.

L'injection d'eau a un effet très bénéfique sur la diminution des émissions des NOx. En fait, en injectant une quantité suffisante d'eau, il est possible d'éliminer complètement la présence des oxydes d'azote.

Par exemple, le moteur non modifié fonctionnant à pleine charge à 2000 rpm avec une valeur de ϕ de 0.52 produit 780 ppm des NOx. En injectant 12.5% massique d'eau (eau/air) dans l'admission, il est possible

d'éliminer complètement les NOx. L'impact sur les performances n'a pas été pris en note pour ce cas précis. Cependant, pour les mêmes conditions de fonctionnement et 7.5% d'eau, la puissance passe de 22.4 à 21.9 c.v. tandis que le couple passe de 58.8 à 58.2 lb-ft.

À 2500 rpm, pleine charge et ϕ de 0.52, une diminution de 70% des NOx est observée pour une injection de 6% d'eau, toujours dans des rapports massiques. La puissance passe de 32.7 à 32 c.v. et le couple passe de 68.6 à 67.2 lb-ft. L'ajout de 10% d'eau entraîne une diminution de 85% des NOx. Dans ce cas, la puissance chute à 30.9 c.v. et le couple diminue jusqu'à 64.3 lb-ft.

L'injection d'eau élimine aussi les problèmes de pré allumages. Cependant, vu le manque d'études sur l'injection d'eau dans les moteurs, les effets à long terme sont peu connus. Cette solution peut en effet entraîner une contamination de l'huile ainsi qu'une corrosion accrue.

7 CONCLUSION

Le présent projet a comme but de valider une technique pour diminuer le retour de flamme présent dans les moteurs à piston fonctionnant à l'hydrogène. La modification apportée au cycle de base a été de séparer le port d'entrée en deux pour laisser passer l'air frais en premier et ensuite injecter l'hydrogène.

La validation de cette technique a été validée numériquement par simulation et expérimentalement. Les essais sur banc d'essai ont donc été réalisés pour le moteur modifié et pour le moteur dans son état d'origine, ceci, afin de comparer les résultats. Un logiciel a été conçu et permet le calcul de plusieurs variables concernant le fonctionnement d'un moteur à pistons fonctionnant à l'hydrogène. Celui-ci permet le calcul des performances et efficacités du moteur tout en permettant d'observer l'évolution de nombreuses variables tout au long de la simulation. Les résultats présentés montrent l'influence de certains paramètres tels que : l'avance à l'allumage, l'ajout d'un compresseur et l'injection d'eau. Les résultats présentés plus haut démontrent que le modèle numérique représente assez bien la réalité. Le manque d'équipement pour l'acquisition de données expérimentales empêche l'optimisation du simulateur puisqu'il est impossible de savoir où se situent les principaux écarts entre l'expérimentation et la théorie.

Concernant l'admission séparée, approche adoptée par l'IRH pour améliorer le fonctionnement des moteurs à hydrogène, il s'avère que le fonctionnement du moteur a été empiré à tout point. D'abord, le moteur émet beaucoup plus de NOx, jusqu'à 16 fois les émissions du moteur d'origine fonctionnant lui aussi à l'hydrogène. Une baisse de puissance d'environ 15 % a été observée et les problèmes de pré allumage ont été amplifiés. Ces résultats permettent d'entrevoir les effets de l'injection directe d'hydrogène dans un moteur à piston.

8 TRAVAUX FUTURS ET PERSPECTIVES

Plusieurs tests intéressants pourraient être réalisés concernant le fonctionnement de moteur à hydrogène. Des tests poussés sur l'injection d'eau permettraient d'établir une relation entre la quantité d'eau injectée et la diminution des NOx observée. L'utilisation d'un compresseur rendrait l'injection d'eau encore plus intéressante [45]. L'injection directe d'eau pourrait aussi être une avenue intéressante à étudier. Des études sur l'injection d'eau après la combustion pourraient être réalisées. En même temps, une étude sur ses impacts à long terme permettrait de vérifier si cette solution peut être envisagée. La comparaison des résultats avec injection d'eau et recirculation des gaz d'échappement serait aussi intéressante.

L'injection directe d'hydrogène pourrait aussi être étudiée, mais devrait être menée conjointement avec une étude sur l'augmentation de la turbulence afin de ne pas avoir des résultats comme ceux présentés dans ce présent rapport.

Une étude sur les matériaux permettrait de plus de trouver un revêtement de surface à appliquer sur les soupapes d'échappement afin de réduire leur température. Le mode d'allumage pourrait aussi être étudié afin de réduire le problème de pré allumage relié aux points chauds. L'allumage par laser [46] pourra éventuellement être étudié afin de vérifier si elle apporte certaines améliorations au problème de préallumage. La technologie de l'allumage catalytique [47] pourrait amener certaines améliorations. La maîtrise de la photo-détonation [48] permet d'éliminer complètement la présence de points chauds liés au système d'allumage. Ce mode d'allumage constitue donc une solution très intéressante pour le moteur à hydrogène.

Le cycle « Scuderi split cycle » permettrait de réduire de façon appréciable les problèmes de pré allumage. En effet, les phases d'admission et de compression ne sont pas réalisées dans le même cylindre que les phases de combustion et d'échappement. Durant l'admission, les gaz frais ne sont donc pas exposés aux points chauds. Ce cycle permettrait aussi la réduction des NOx. Il serait donc intéressant de réaliser des essais sur un tel moteur. On peut retrouver toute la documentation sur ce cycle sur le site www.scuderigroup.com.

Comme nous l'avons vu à la section 2.2.4, le moteur à piston est mal adapté à l'hydrogène même s'il est relativement simple de le faire fonctionner. Pas besoin de carburateur ou système d'injection, un simple régulateur de pression est suffisant pour faire fonctionner un moteur à l'hydrogène. Dans ce cas, le régulateur de pression remplace le carburateur et permet l'ajout d'hydrogène à débit constant. Un tel moteur est cependant très peu optimisé et peu pratique. Étant donnée l'absence de système de contrôle électronique, il est impossible de maximiser les performances et la consommation du moteur. Cependant, cette solution reste suffisante pour un moteur de tondeuse et les autres petites applications de ce genre. Le fonctionnement

efficace et sans problème lié au préallumage et à la formation de NOx est cependant plus complexe. Même en utilisant un système d'injection très sophistiqué, il est présentement presque impossible de faire fonctionner un moteur à piston avec un mélange riche en hydrogène, du moins, avec l'injection indirecte. Entrer dans l'ère de l'hydrogène avec une technologie plus que centenaire semble absurde. On tente à tout prix de modifier le moteur à piston pour permettre son fonctionnement à l'hydrogène sans toutefois proposer de nouvelles solutions mieux adaptées comme les moteurs de type rotatif. Le temps est venu de revoir complètement le moteur à combustion interne et le concevoir en fonction des propriétés de l'hydrogène. La technologie du moteur rotatif semble accommoder davantage ce nouveau carburant, en éliminant les problèmes de pré allumages.

9 LISTE DES RÉFÉRENCES

- [1] www.moteurnature.com/actu/2003/rx8.php
- [2] www.bmwtransact.com/hydrogen/Cars_745hi.htm
- [3] www.bmwtransact.com/hydrogen/cars_h2r.htm
- [4] www.fordvehicles.com/trucks/ranger/features/specs/
- [5] www.media.ford.com/article_display.cfm?article_id=14047
- [6] DUQUET Denis, Gélinas Gabriel, Godin Bertrand. 2006. Le Guide de l'auto 2006, éditions du trécaré, Outremont.
- [7] JOHNSON N.L. «Hydrogen as a zero-emission, high efficiency fuel: uniqueness, experiments and simulation». 3rd Int. Conf. ICE97, Internal combustion engine: experiments and modeling, Naples, Italy, 1997.
- [8] FONTANA G., Galloni E., Jannelli E., and Minutillo M. «Numerical modelling of a spark-ignition engine using premixed lean gasoline-hydrogen-air mixture». 14th World Hydrogen Energy Conference, Montreal, Canada, 2002.
- [9] HEYWOOD John B. 1988. Internal combustion engine fundamental, McGraw Hill.
- [10] FERGUSON C.R. 1986. Internal combustion engine, New York, Wiley.
- [11] ALEXANDROU Andreas N. 2001. Principles of fluid mechanics, New Jersey, Upper Saddle River, Prentice Hall.
- [12] JOHN E.A. James. 1974. Gas dynamics, Department of mechanical engineering, University of Maryland, Allyn and Bacon, Boston, fifth edition, 394 p.
- [13] KIESGEN Gerrit, Manfred Kluting, Bock Christian, Fisher Hubert, 2006, «The new 12-cylinder hydrogen engine in the 7 series : The H2ICE age begun». SAE World congress 2006, p. 13-21.
- [14] PRABHU-KUMAR G.P., Nagalingam B., and Gopalakrishnan K.V. «Theoretical studies of a spark-ignited supercharged hydrogen engine». Int. J. Hydrogen Energy, 10:389-397,1985.
- [15] KECK J.C. «Turbulent flame structure and speed in spark-ignition engines». 19th Symp. (Int.) on combustion, pages 1451-1466, 1982.
- [16] HOFFMAN Joe D., Zucrow Maurice J. Gas dynamics, School of mechanical engineering Purdue University, John Wiley and sons, New York, vol. 1, 772 p.
- [17] www1.eere.energy.gov
- [18] WINTERBONE D.E. 1997. Advanced thermodynamics for engineers, New York, John Wiley & Sons inc. 378 p.
- [19] HORLOCK and Winterbone. 1982. The thermodynamics and gaz dynamics of internal combustion engine, vol. 1 et 2, Oxford science publication.
- [20] CAMPBELL Ashley S. 1979. Thermodynamic analysis of combustion engines, Robert E. Krieger publishing company, Florida, 366 p.

- [21] TURNS Stephen R. 2000. An introduction to combustion, McGraw-Hill Boston, Toronto, 676 p.
- [22] BORMAN Gary L., Ragland Kenneth W. 1998. Combustion engineering, McGraw-Hill Boston, 613 p.
- [23] www.eere.energy.gov
- [24] BENSON R.S., Horlock J.H. and Winterbone D.E. 1982. The thermodynamics and gas dynamics of internal combustion engines, vol.1, Clarendon press, oxford.
- [25] HERMANN Rottengurber, Ulrichwiebke. 2001. «Hydrogen diesel engine with direct injection, high power density and low exhaust gas emissions», MTZ Motortechnische Zeitschrift, Report. 61.
- [26] FAGELSON J.J., McClean W.J. 1978. «Performance and NOx emissions of spark ignited combustion engines using alternative fuels-quasi one dimensional modeling», Combustion science and technology, vol. 18, p. 47-57.
- [27] KHAJURIA P.R., Mathur H.B. 1986. «A computer simulation of hydrogen fuelled spark ignition engine», International Journal of Hydrogen Energy, vol. 11, no. 6, p. 409-417.
- [28] JIE Ma, Yongkang Su. 2003. «Simulation and prediction on the performance of a vehicle's hydrogen engine», International journal of hydrogen energy, vol. 28, p. 77-83.
- [29] BENSON R.S., Annand W.J.D and Baruah P.C. 1975. «A simulation model including intake and exhaust system for a single cylinder four stroke cycle spark ignition engine», international journal of mechanical sciences, vol. 17, no. 2, p. 97-123.
- [30] Chevrolet Tracker Service manual, 2001. Volume 2, North American Operations, General Motors Corporation, Warren, Michigan 48090
- [31] OLIKARA Cherian and Borman Gary L. «A computer program for calculating properties of equilibrium combustion products with some applications to I.C. Engines», SAE, paper 750468.
- [32] CHAPMAN M. Novak, J.M., and Stein R.A. 1982. «Numerical modeling of inlet and exhaust flows in multi-cylinders internal combustion engines», Flows in internal combustion engines, ASME, p. 9-19.
- [33] AL-JANABI and Al-Baghdadi, 2003. «A prediction study of a spark ignition supercharged hydrogen engine», Energy conversion and management, vol. 44, p. 3143-3150.
- [34] SAE recommended practice engine test code. SAE paper J816b, in SAE handbook, 1979, p. 24.08.
- [35] BORGNAKKE Claus, Sonntag Richard E., Van Wylen Gordon J. 1998. Fundamentals of thermodynamics, New York, John Wiley & Sons, fifth edition, 783 p.
- [36] PRIOR Andrew, Jaaskelainen Hannu, Walsh Janette «NOx emission study : An investigation of water-based emission control technologies». Fleetway inc. October 2005.
- [37] KREYSIG Erwin. 1999. Advanced engineering mathematics, New York, John Wiley and sons, 8th edition, 1156 p.
- [38] VAFIDIS and Withelaw. 1986. «Intake soupape and in-cylinder flow developpment in a four stroke model engine», Mechanical Engineering Science, vol. 200, no. 2, p. 143-152.
- [39] BLAIR, Gordon P. 1999. Design and simulation of four-stroke engine, SAE, 815 p.
- [40] STONE, Richard. 1999. Introduction to internal combustion engines, third edition, SAE.

- [41] W.J.D Escher, Prospects for liquid hydrogen fueled commercial aircraft, Escher Foster Techn. Ass. Rep. PR-37 (1973).
- [42] NISHIWAKI, K., Shimamoto, Y., and Miyake, K. 1979. «Average heat transfert coefficient on a cylinder wall in the intake and exhaust process of motoring test», Bull J.S.M.E. 22, 174, 1796-1809 (1979)
- [43] LAVOIE, G. and Heywood J.B. 1970. «Experimental and theoretical study of nitric oxide formation in internal combustion engines», Combustion Science and Technologie, vol. 1, p. 313-326.
- [44] VERSTEEG H., Malalasekera W., An introduction to computational fluid dynamics : The finite volume method, Addison-Wesley, 1996.
- [45] http://en.wikipedia.org/wiki/Water_injection_
- [46] http://www.cfdrc.com/serv_prod/propulsion_dev/lis.html
- [47] <http://www.smartplugs.com/about.htm>
- [48] <http://fr.wikipedia.org/wiki/Quasiturbine>
- [49] www.gtisoft.com/img/broch/broch_gtpower.pdf
- [50] www.lanl.gov/orgs/t/t3/docs/KIVA-3V.pdf
- [51] LAMBE S.M. and Watson H.C. 1992. «Low polluting, energy efficient C.I. hydrogen engine», International Journal of Hydrogen Energy, vol. 17, 7, p. 513-525.
- [52] MASOOD M., Ishrat M.M. and Reddy A.S. 2006. «Modelling and simulation with experimental verification of hydrogen-diesel dual-fuel premixed combustion and emission analysis » International Journal of Alternative Propulsion, vol. 1, 4.
- [53] SHER E. and Hacoheh Y. 1989. «Measurements and predictions of the fuel consumption and emission of a spark ignition engine fuelled with H₂-enriched gasoline», Proceedings of the institution of mechanical engineers, PT-A, Journal of Power Engineering, vol. 203, p. 155-162.
- [54] SIERENS R. and Verhelst S. «Hydrogen fuelled internal combustion engine», Laboratory of transport technology, Ghent University.
- [55] http://en.wikipedia.org/wiki/Mass_flow_sensor

APPENDICE A : LE SIMULATEUR

La figure A-1 représente la fenêtre principale du logiciel de simulation. Cette fenêtre sert à entrer certaines valeurs de départ et affiche autant les résultats que les paramètres mécaniques du moteur. La fenêtre « Operating Parameters » permet à l'utilisateur de rentrer certaines valeurs. Les paramètres de la fenêtre « Engine Parameters » peuvent aussi être modifié, mais cette fois-ci, par le concepteur, via le code de programmation. Les deux fenêtres « Output » affichent des résultats pour la partie admission et combustion. La simple lecture de ces résultats permet de conclure si un problème est survenu dans la simulation. Ce logiciel n'est pas adapté à un utilisateur quelconque, mais plutôt conçu pour être utilisé par son concepteur.

Simulation H2 Engine

OPERATING PARAMETERS

RPM (entre 1000 et 6000)

EGR (between 0 and 40% mass)

T EGR

SPARK ADVANCE

INJECTION START ANGLE

H2 valve (50-290)

NOx calculation (longer) ☐ YES ☒ NO

ENGINE PARAMETERS

FUEL

RPM

Bore diameter mm

Stroke mm

Connecting rod mm

Compression ratio

Displacement volume cc

Dead Volume cc

Spark plug gap mm

Spark plug location

Ignition Timing degree

Injection Timing degree

Injection Duration degrees

Valve Timing

IVD

IVC Effective

H2VD

H2VC

EVD

EVC Effective

T wall cylindre Kelvin

P intake manifold kPa

P exhaust manifold kPa

T EGR Kelvin

INTAKE Output

Mass (Fresh Air) grams

Mass (Residual) grams

% Residual %

Mass (H2) grams

Vol. Efficiency EGR inclus %

EGR exclus %

PHI

T residual Kelvin

P residual kPa

EGR %m

COMBUSTION Output

P(spark) kPa

Tu(spark) Kelvin

Tb(spark) Kelvin

Comb. Duration degrees

Maximum P kPa

Maximum T Kelvin

Mass lost grams

% mass lost C

P EVD kPa

T EVD Kelvin

Max. Flame Speed m/s

Av. Flame Speed m/s

SPECIES

POST PROCESSING

☐ AJOUT TURBO DANS ADM_PRÉCALCUL

Air water content 10.7g(eau)/kg (air sec)

Figure A-1 : L'interface principale

La figure A-2 apparaît lorsque l'on appuie sur le bouton « Performance, efficiency and NOx ». Cette fenêtre permet le calcul des performances du moteur, de son efficacité et de sa consommation. Pour ce qui est de la figure A-3, elle représente simplement l'arbre du programme contenant l'ensemble des modules de calcul et fenêtre de contrôle.

Form1

COMPUTE/SAVE results
Back to Main

RPM
Label1

PERFORMANCE

imepg
Label7
bars
imepn
Label8
bars
tmep
Label9
bars
tmep max
Label29
bars
tmep min
Label30
bars
bmep
Label13
bars
bmep max
Label31
bars
bmep min
Label32
bars
ihp
Label19
hp
fhp
Label20
hp
fhp max
Label26
hp
fhp min
Label27
hp
bhp
Label21
hp
bhp max
Label28
hp
bhp min
Label33
hp

EFFICIENCY

Volumetric efficiency
Label2
%
Mechanical efficiency
Label3
%
Thermal efficiency
Label4
%
Fuel conversion efficiency
— ideal otto cycle
Label18
%
— real (Thermal)
Label14
%

NOx

Label5
PPM

CONSUMPTION

Air Flow
Label10
kg/hr
Label34
CFM
H2 Consumption
Label11
kg/hr
(F/A)mass
Label15
(A/F)mass
Label16
phi
Label17
isfc
Label12
ug/J
Label6
g/kWh
bsfc
Label22
ug/J
Label24
g/kWh
O2 exhaust
Label25
%

Figure A-2 : Fenêtre des performances

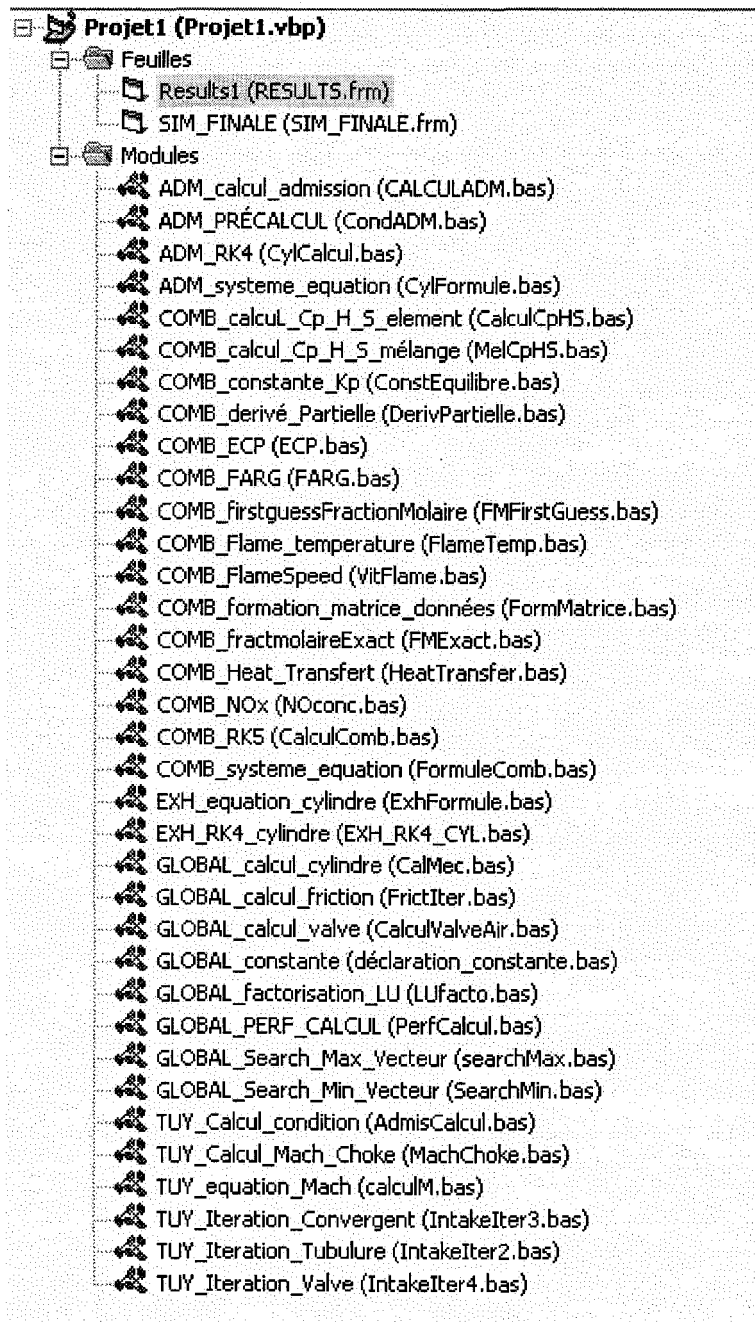


Figure A-3 : Arbre du programme

APPENDICE B : ADMISSION

La figure B-1 représente le schéma de la tubulure d'admission tel que représenté dans le simulateur :

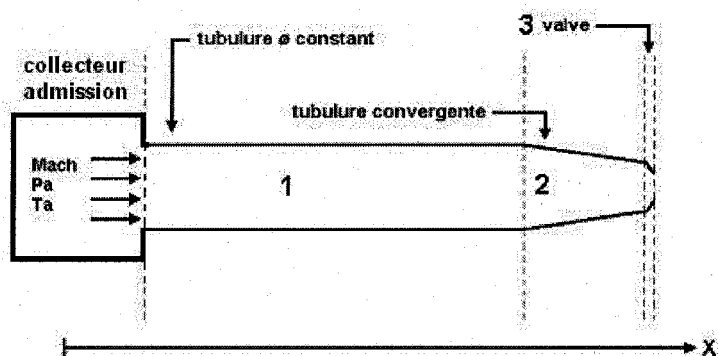


Figure B-1 : Schéma de la tubulure

Comme nous pouvons le constater, celle-ci est composée de quatre sections. Ici, P_a et T_a sont les conditions dans le collecteur d'admission. La figure B-2 représente la forme réelle de la tubulure. Les chiffres représentent les longueurs approximatives en pouce de chacune des sections.

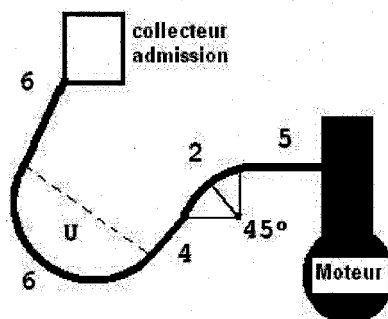


Figure B-2 : La géométrie réelle de la tubulure d'admission

Les dimensions exactes de la tubulure sont présentées dans le tableau qui suit :

Tableau B-1 : Les dimensions de la tubulure d'admission

Section	Diamètre entrée (mm)	Diamètre sortie (mm)	Longueur (mm)
1. Tubulure section constante	44.5	44.5	430
2. Tubulure convergente	44.5	27	100
3. Soupape	27	variable	variable

L'une des valeurs les plus critiques est sans aucun doute la section engendrée par la soupape. Ce calcul est présenté dans l'appendice C. La valeur de la levée permet de calculer le débit. Les dimensions de la

soupape sont tirées du manuel d'entretien [30]. La figure B-3 représente une soupape et les dimensions principales :

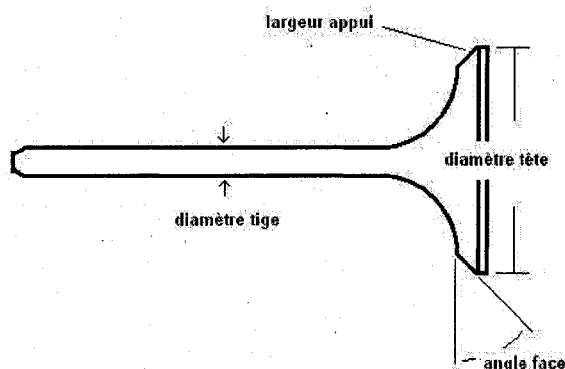


Figure B-3 : Soupape

Les dimensions importantes sont les trois montrées sur la figure. Voici donc les valeurs en question :

- Diamètre tige = 5.965-5.98 mm
- Diamètre tête = 30 mm (mesuré)
- Angle face = 45 °
- Largeur appui = 1.1-1.3 mm

D'autres valeurs concernant la géométrie de la partie où la soupape est logée pourraient être intéressantes à connaître. Cependant, pour le cas qui nous intéresse, on peut se contenter de ces quatre mesures et trouver une valeur approximative pour les autres. Sinon, il faudrait démonter le moteur et il y a bien des chances que certains endroits ne soient pas directement accessibles pour prendre des mesures. Pour ce qui est de la levée de la soupape en fonction de l'angle du vilebrequin, nous avons dû la mesurer directement sur le moteur. Les données ont été amassées à tous les cinq degrés de rotation de l'arbre à cames. Voici ces données :

Tableau B-2 : Mesures de la levée de la soupape d'admission

cames °	Levée (po)	Vilebrequin °
0	0	0
5	0	10
10	0.004	20
15	0.01	30
20	0.021	40
25	0.037	50
30	0.059	60
35	0.086	70
40	0.122	80
45	0.164	90
50	0.216	100
55	0.273	110
60	0.32	120

65	0.333	130
70	0.32	140
75	0.273	150
80	0.216	160
85	0.164	170
90	0.122	180
95	0.086	190
100	0.059	200
105	0.037	210
110	0.021	220
115	0.01	230
120	0.004	240
125	0	250
130	0	260

Le tableau B-3 présente quelques données supplémentaires concernant le moteur et la synchronisation des soupapes :

Tableau B-3 : Données concernant le moteur et les soupapes

Diamètre cylindre (mm)	84
Course piston (mm)	90
Taux de compression	9.7
Ouverture soupape air	20° BTDC
Fermeture soupape air	40° ABDC
Ouverture soupape H2	50° ATDC
Fermeture soupape H2	120° ABDC

APPENDICE C : DISCUSSION SUR LE RENDMENT VOLUMÉTRIQUE

Ici, ce qui nous intéresse, c'est la masse d'air introduite dans le cylindre en fonction du RPM. Étant donné les simplifications et hypothèses, il faut envisager un écart avec les valeurs expérimentales. L'admission des gaz dans un moteur est un phénomène extrêmement complexe à modéliser. La valeur utilisée pour valider le système sera le rendement volumétrique. Celui-ci dépend de plusieurs facteurs. Voici d'abord comment est calculée cette valeur :

$$\mathcal{E} = \frac{M_a}{M_d}$$

\mathcal{E} = Efficacité (rendement) volumétrique

M_a = Masse réellement aspirée

M_d = Masse déplacée

$$M_d = V_d \rho_{amb}$$

V_d = Volume déplacé ($V_{BDC} - V_{TDC}$)

ρ_{amb} = Densité ambiante

Afin de bien comprendre les différentes sources d'erreur, voici les paramètres influençant le rendement volumétrique d'après [9].

RPM : Selon la vitesse du moteur, la vitesse de l'écoulement de l'air à la section de la soupape augmente. À haut RPM, il peut y avoir étranglement, ce qui réduit considérablement le rendement. L'effet du chevauchement « overlap » des soupapes d'admission et d'échappement varie beaucoup en fonction du rpm.

SOUPAPE LIFT : Le « lift » ou la levée de la soupape a également beaucoup d'importance. Plus cette valeur est élevée, plus la section de la soupape sera grande, jusqu'à un maximum, et plus le débit d'air sera élevé.

SOUPAPE TIMING : Les temps d'ouverture des soupapes sont extrêmement importants dans le calcul du rendement volumétrique. C'est ce facteur, tout comme le volume mort, qui influence le plus la quantité de gaz d'échappement réintroduit dans le cylindre lors de l'admission. Dans un moteur conventionnel, il y a normalement un chevauchement entre les temps de soupapes. C'est-à-dire qu'au début de la phase d'admission, la soupape d'admission et les deux soupapes d'échappements sont ouvertes en même temps. Une certaine quantité de gaz brûlé peut être réintroduite dans le cylindre diminuant du même coup la quantité d'air frais pouvant entrer. Cet effet est trop complexe pour être modélisé, il s'agira plutôt d'une

quantité pouvant être ajusté afin de coller aux résultats expérimentaux. De plus, une certaine quantité de gaz brûlé peut se retrouver derrière la soupape d'admission d'air.

TAUX DE COMPRESSION : Le volume mort détermine la quantité minimale de gaz d'échappement réintroduit dans le cylindre. Plus le taux de compression est élevé et plus le volume mort est petit. Plus le volume mort est petit, plus le rendement volumétrique est élevé. La figure C-1 représente l'influence des trois premiers facteurs.

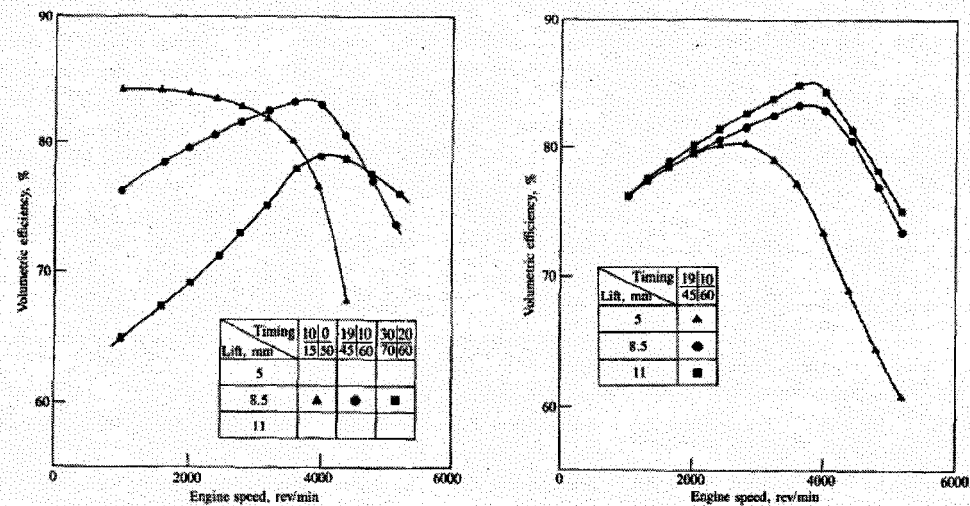


Figure C-1 : Facteurs influençant le rendement volumétrique (Heywood [9])

Pour ce qui est du timing des soupapes : Intake soupape Open (before TDC) top-left, close (after BDC) bottom-left, Exhaust soupape Open (before BDC) top-right, close (after TDC) bottom-right.

TRANSFERT DE CHALEUR : L'analyse du transfert de chaleur a été négligée, car l'effet est minime et son influence est trop complexe pour être validé. Une étude [42] montre que le réchauffement du moteur entraîne une diminution du rendement volumétrique, comme on peut le voir sur la figure C-2, tiré du même article.

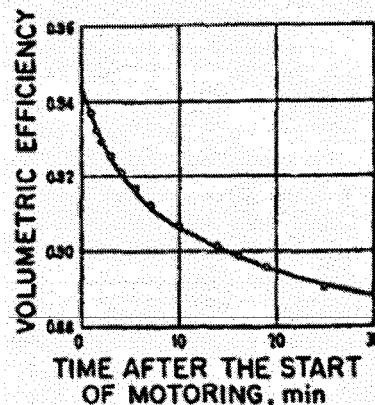


Figure C-2 : Effet du transfert de chaleur sur le rendement volumétrique (Nishiwaki [42])

Pour un moteur normalement refroidi, on prétend que le transfert de chaleur provoque une diminution de 3 à 4 % du rendement volumétrique. L'influence sera plus marquée à bas régime puisque le temps d'exposition des gaz frais aux parois chaudes est plus élevé. À haut régime, ce temps est très petit et donc l'impact de la chaleur est faible.

PRESSIION DANS LES MANIFOLD : La pression dans le système d'échappement et d'admission a une très grande importance. Ce paramètre doit être obtenu de façon expérimentale.

EGR : La présence d'un système antipollution de recirculation des gaz d'échappement influence le rendement puisque l'on introduit des gaz brûlés plutôt que des gaz frais.

SECTION DE LA SOUPAPE : La façon de calculer l'aire d'ouverture de la soupape a aussi un rôle important. La première est la plus simpliste et correspond à la circonférence de la soupape multipliée par la levée ($\pi D_v L$). La deuxième présentée par Blair [39] tient compte de la géométrie et est donc beaucoup plus réaliste. La valeur maximale (A_p) est celle de la section de la tubulure à laquelle on a soustrait la section de la tige de la soupape. Cependant, dans la réalité, l'aire effective de la soupape sera encore plus petite que celle calculée avec la méthode de Blair. La figure qui suit présente l'aire effective calculée de façon expérimentale comparativement à l'aire calculée par $\pi D_v L$.

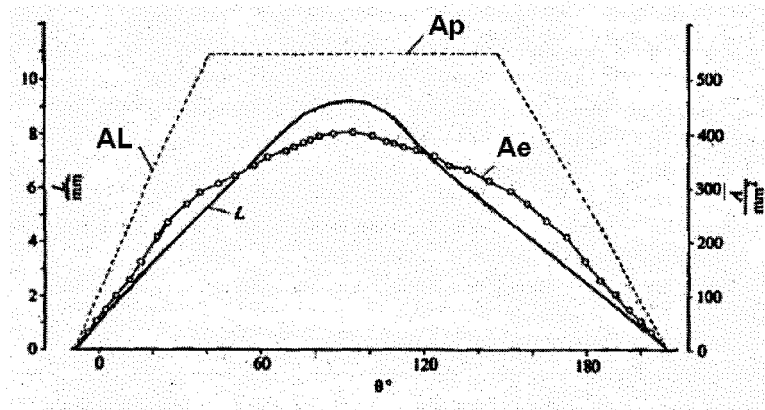


Figure C-3 : Section effective de la soupape (Vafidis [38])

On peut voir sur la figure C-3 que les valeurs de la courbe de l'aire effective A_e sont beaucoup plus faibles que les valeurs de la courbe A_L . Ici, $A_e = C_d A_L$ ou C_d est ce qu'on appelle le coefficient de décharge et est déterminé de façon expérimentale. La figure C-4 montre la valeur de ce coefficient pour différentes valeurs de $(L/D)_v$. Deux résultats sont présentés, soit les valeurs expérimentales calculées par Chapman et Novak

[32] et les valeurs typiques du coefficient pour une soupape conventionnelle « poppet soupape » présentée dans le livre de Heywood [9]. Noter ici que les valeurs de Heywood ont été modifiées pour être appliquées sur la section effective calculée avec les formules de Blair tel que discuté plus haut.

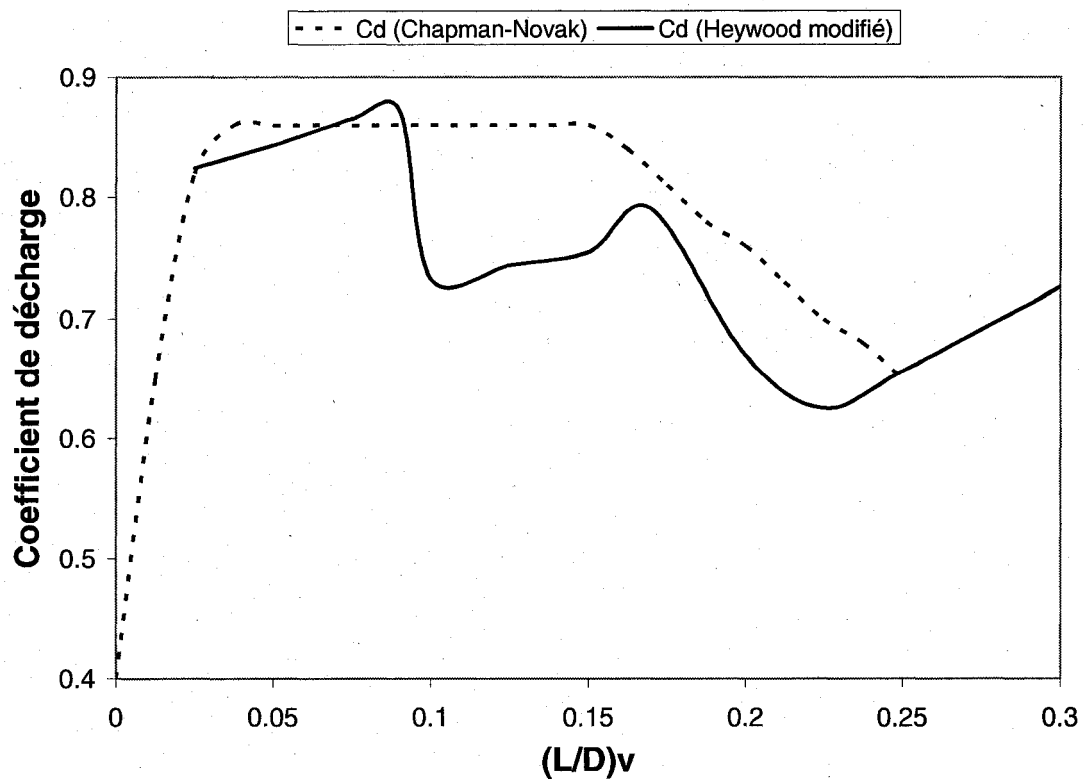


Figure C-4 : C_d

Si on utilise cette distribution des valeurs du coefficient de perte de charge, on obtient une section effective bien différente. La figure C-5 présente l'ajustement de la section de la soupape en fonction des coefficients de perte de charge des différents auteurs.

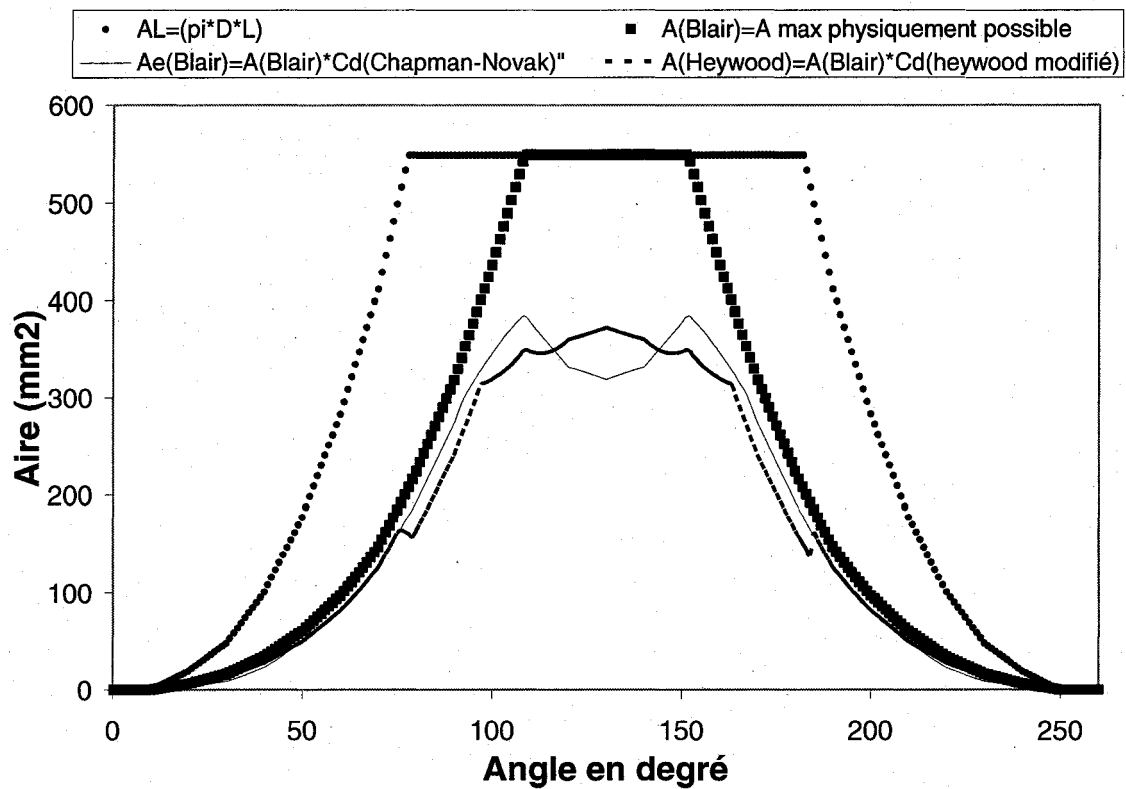


Figure C-5 : Effet des différents coefficients de décharge

APPENDICE D : CALCULS DIVERS

D.1 Calcul de la variation du volume spécifique

$$v = \frac{RT_i}{P} \quad v_i = v_i(T_i, P) \quad \frac{dv_i}{d\theta} = \frac{\partial v_i}{\partial T_i} \frac{dT_i}{d\theta} - \frac{\partial v_i}{\partial P} \frac{dP}{d\theta}$$

On a donc besoin de connaître les trois expressions suivantes : ∂v_i , ∂T_i et ∂P .

$$\frac{\partial \ln v_i}{\partial v_i} = \frac{1}{v_i} \rightarrow \partial \ln v_i = \frac{\partial v_i}{v_i} \Rightarrow \partial v_i = v_i \partial \ln v_i$$

$$\frac{\partial \ln T_i}{\partial T_i} = \frac{1}{T_i} \rightarrow \partial \ln T_i = \frac{\partial T_i}{T_i} \Rightarrow \partial T_i = T_i \partial \ln T_i$$

$$\frac{\partial \ln P}{\partial P} = \frac{1}{P} \rightarrow \partial \ln P = \frac{\partial P}{P} \Rightarrow \partial P = P \partial \ln P$$

En utilisant ces trois équations, on peut calculer $\frac{\partial v_i}{\partial T_i}$ et $\frac{\partial v_i}{\partial P}$:

$$\frac{\partial v_i}{\partial T_i} = \frac{v_i}{T_i} \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln T_i} \quad \frac{\partial v_i}{\partial P} = \frac{v_i}{P} \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln P}$$

On obtient donc :

$$\boxed{\frac{dv_i}{d\theta} = \frac{v_i}{T_i} \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln T_i} \frac{dT_i}{d\theta} - \frac{v_i}{P} \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln P} \frac{dP}{d\theta}}$$

D.2 Calcul de la variation de l'énergie interne

$$u_i = T_i s_i - P v_i \quad u_i = u_i(T_i, P) \quad \frac{du_i}{d\theta} = \frac{\partial u_i}{\partial T_i} \frac{dT_i}{d\theta} + \frac{\partial u_i}{\partial P} \frac{dP}{d\theta}$$

$$\left(\frac{\partial u_i}{\partial T_i} \right)_P = T_i \left(\frac{\partial s_i}{\partial T_i} \right)_P + s_i \left(\frac{\partial T_i}{\partial T_i} \right)_P - P \left(\frac{\partial v_i}{\partial T_i} \right)_P \quad \left(\frac{\partial u_i}{\partial P} \right)_T = T_i \left(\frac{\partial s_i}{\partial P} \right)_T - P \left(\frac{\partial v_i}{\partial P} \right)_T - v_i \left(\frac{\partial P}{\partial P} \right)_T$$

$$T \left(\frac{\partial s_i}{\partial T_i} \right)_P = c p_i$$

$$\left(\frac{\partial v_i}{\partial T_i} \right)_P = \frac{v_i}{T_i} \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln T_i}$$

Or :

$$\left(\frac{\partial s_i}{\partial P} \right)_T = - \left(\frac{\partial v_i}{\partial T_i} \right)_P = - \frac{v_i}{T_i} \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln T_i}$$

$$\left(\frac{\partial v_i}{\partial P} \right)_T = \frac{v_i}{P} \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln P}$$

On a donc :
$$\frac{du_i}{d\theta} = \left[cp_i - \frac{Pv_i}{T_i} \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln T_i} + s \right] \frac{dT_i}{d\theta} - v_i \left[\frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln T_i} + \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln P} + 1 \right] \frac{dP}{d\theta}$$

Pour une réaction isentropique :
$$\boxed{\frac{du_i}{d\theta} = \left[cp_i - \frac{Pv_i}{T_i} \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln T_i} \right] \frac{dT_i}{d\theta} - v_i \left[\frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln T_i} + \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln P} \right] \frac{dP}{d\theta}}$$

D.3 Calcul de la variation du logarithme naturel du volume spécifique

$$(\partial \ln(v))_P = \left(\partial \ln \left(\frac{RT}{P} \right) \right)_P = \frac{1}{T}$$

$$(\partial \ln(v))_T = \left(\partial \ln \left(\frac{RT}{P} \right) \right)_T = -\frac{1}{P}$$

$$(\partial \ln(T))_P = \left(\partial \ln \left(\frac{PV}{M(T)R} \right) \right)_P = -\frac{1}{M} \frac{\partial M}{\partial T}$$

$$(\partial \ln(P))_T = \left(\partial \ln \left(\frac{M(P)RT}{V} \right) \right)_T = \frac{1}{M} \frac{\partial M}{\partial P}$$

$$\left(\frac{\partial \ln(v)}{\partial \ln(P)} \right)_T = [\partial \ln(v) - \partial \ln(P)]_T = -1 - \frac{P}{M} \frac{\partial M}{\partial P}$$

$$\left(\frac{\partial \ln(v)}{\partial \ln(T)} \right)_P = [\partial \ln(v) - \partial \ln(T)]_P = 1 - \left(-\frac{T}{M} \frac{\partial M}{\partial T} \right)$$

Voir appendice F pour calcul de dM/dT et dM/dP

APPENDICE E : CALCUL DES FRACTIONS MOLAIRES

MÉLANGE PAUVRE

$$f1 = 1.0222x_1 + x_2 + 1.0222x_3 + x_4 + x_5 + 1.0222x_6 + x_7 + 1.0444x_8 + 1.0222x_9 - 1 = 0 \quad (5.49)$$

$$f2 = (2\phi - 2)x_1 - 2x_2 + (2\phi - 1)x_3 - x_4 + 2\phi x_6 + 4\phi x_8 + 2\phi x_9 = 0 \quad (5.50)$$

$$f3 = 3.7274x_1 + 3.7274x_3 - 2x_5 + 2.7274x_6 - x_7 + 7.4548x_8 + 3.7274x_9 = 0 \quad (5.51)$$

On a donc trois équations non linéaires avec trois inconnues (x_1, x_5, x_8) que l'on peut exprimer comme suit :

$$f_j(x_1, x_5, x_8) = 0, \dots, j = 1, 2, 3$$

Supposons que l'on connaît un vecteur approximatif $[x_1^{(1)}, x_5^{(1)}, x_8^{(1)}]$ qui est relativement près du vecteur solution $[x_1^*, x_5^*, x_8^*]$. Ce dernier n'est bien sûr pas connu. De cette façon, on peut donc étendre la fonction

f_j autour du vecteur connu selon la série de Taylor. En négligeant les dérivées partielles de second ordre et plus, nous obtenons :

$$f_j + \frac{\partial f_j}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f_j}{\partial x_5} \Delta x_5 + \frac{\partial f_j}{\partial x_8} \Delta x_8 \cong 0, \dots, j = 1, 2, 3 \quad (\text{Équation de la série de Taylor})$$

$$\text{où } \Delta x_i = x_i^* - x_i^{(1)} \dots i = 1, 5, 8$$

La fonction f_j et ses dérivées partielles sont évaluées pour le vecteur connu. On peut donc résoudre ces équations linéaires pour $\Delta x_1, \Delta x_5, \Delta x_8$ en utilisant la méthode d'élimination de Gauss. La nouvelle valeur est donc :

$$x_i^{(2)} = x_i^{(1)} + \Delta x_i \dots i = 1, 5, 8$$

Tant que l'on n'a pas satisfait toutes les équations du système, on continue à itérer. Voici la démarche utilisée pour résoudre ce problème. Celle-ci est basée sur la méthode d'élimination de Gauss.

On a donc nos trois équations qui dépendent de x_1, x_5 et x_8 . Afin de simplifier le problème, nous décrivons les dérivées partielles comme suit :

$$D_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial x_j} \quad i = 2, 3, 4, 6, 7, 9 \text{ et } j = 1, 5, 8$$

À partir des équations 5.60 à 5.65, on obtient

$$\begin{aligned}
D_{21} &= \frac{C4}{x_8^{1/2}} & D_{48} &= -\frac{1}{4} \frac{C1C4^{1/2}x_1^{1/2}}{x_8^{3/4}} \\
D_{28} &= -\frac{C4}{2} \frac{x_1}{x_8^{1/2}} & D_{65} &= \frac{1}{2} \frac{C6}{C4} \frac{x_8^{1/2}}{x_5^{1/2}} \\
D_{31} &= \frac{1}{2} \frac{C5}{C4^{1/2}} \frac{x_8^{1/4}}{x_1^{1/2}} & D_{68} &= \frac{1}{2} \frac{C6}{C4} \frac{x_5^{1/2}}{x_8^{1/2}} \\
D_{38} &= \frac{1}{4} \frac{C5}{C4^{1/2}} \frac{x_1^{1/2}}{x_8^{3/4}} & D_{75} &= \frac{1}{2} \frac{C3}{x_5^{1/2}} \\
D_{41} &= \frac{1}{2} \frac{C1C4^{1/2}}{x_8^{3/4}x_1^{1/2}} & D_{98} &= \frac{1}{2} \frac{C2}{x_8^{1/2}}
\end{aligned}$$

On peut maintenant exprimer l'équation de la série de Taylor sous la forme d'un produit matriciel

$[A][\Delta x] = [B]$. Les éléments de $[A]$ sont noté comme suit :

$$A_{11} = \frac{\partial f_1}{\partial x_1} = 1.0222 + D_{21} + 1.0222D_{31} + D_{41}$$

$$A_{12} = \frac{\partial f_1}{\partial x_5} = 1 + 1.0222D_{65} + D_{75}$$

$$A_{13} = \frac{\partial f_1}{\partial x_8} = D_{28} + 1.0222D_{38} + D_{48} + 1.0222D_{68} + 1.0444 + 1.0222D_{98}$$

$$A_{21} = \frac{\partial f_2}{\partial x_1} = (2\phi - 2) - 2D_{21} + (2\phi - 1)D_{31} - D_{41}$$

$$A_{22} = \frac{\partial f_2}{\partial x_5} = 2\phi D_{65}$$

$$A_{23} = \frac{\partial f_2}{\partial x_8} = -2D_{28} + (2\phi - 1)D_{38} - D_{48} + 2\phi D_{68} + 4\phi + 2\phi D_{98}$$

$$A_{31} = \frac{\partial f_3}{\partial x_1} = 3.7274 + 3.7274D_{31}$$

$$A_{32} = \frac{\partial f_3}{\partial x_5} = -2 + 2.7274D_{65} - D_{75}$$

$$A_{33} = \frac{\partial f_3}{\partial x_8} = 3.7274D_{38} + 2.7274D_{68} + 7.4548 + 3.7274D_{98}$$

$$B_1 = -f_1 = -(1.0222x_1 + x_2 + 1.0222x_3 + x_4 + x_5 + 1.0222x_6 + x_7 + 1.0444x_8 + 1.0222x_9 - 1)$$

$$B_2 = -f_2 = -((2\phi - 2)x_1 - 2x_2 + (2\phi - 1)x_3 - x_4 + 2\phi x_6 + 4\phi x_8 + 2\phi x_9)$$

$$B_3 = -f_3 = -(3.7274x_1 + 3.7274x_3 - 2x_5 + 2.7274x_6 - x_7 + 7.4548x_8 + 3.7274x_9)$$

MÉLANGE RICHE

$$f1 = 1.0222x_1 + x_2 + 1.0222x_3 + x_4 + x_5 + 1.0222x_6 + x_7 + 1.0444x_8 + 1.0222x_9 - 1 = 0 \quad (5.49)$$

$$f2 = (2\phi - 2)x_1 - 2x_2 + (2\phi - 1)x_3 - x_4 + 2\phi x_6 + 4\phi x_8 + 2\phi x_9 = 0 \quad (5.50)$$

$$f3 = 3.7274x_1 + 3.7274x_3 - 7.4548x_5 + 2.7274x_6 - x_7 + 7.4548x_8 + 3.7274x_9 = 0 \quad (5.51)$$

On a donc trois équations non linéaires avec trois inconnues (x_1, x_2, x_5) que l'on peut exprimer comme suit :

$$f_j(x_1, x_2, x_5) = 0, \dots, j = 1, 2, 3$$

Supposons que l'on connaît un vecteur approximatif $[x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_5^{(1)}]$ qui est relativement près du vecteur solution $[x_1^*, x_2^*, x_5^*]$. Ce dernier n'est bien sûr pas connu. De cette façon, on peut donc étendre la fonction

f_j autour du vecteur connu selon la série de Taylor. En négligeant les dérivées partielles de second ordre et plus, nous obtenons :

$$f_j + \frac{\partial f_j}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f_j}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial f_j}{\partial x_5} \Delta x_5 \cong 0, \dots, j = 1, 2, 3 \quad (\text{Équation de la série de Taylor})$$

$$\text{où } \Delta x_i = x_i^* - x_i^{(1)} \dots i = 1, 2, 5$$

La fonction f_j et ses dérivées partielles sont évaluées pour le vecteur connu. On peut donc résoudre ces équations linéaires pour $\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_5$ en utilisant la méthode d'élimination de Gauss. La nouvelle valeur est donc :

$$x_i^{(2)} = x_i^{(1)} + \Delta x_i \dots i = 1, 2, 5$$

Tant que l'on n'a pas satisfait toutes les équations du système, on continue à itérer. Voici la démarche utilisée pour résoudre ce problème. Celle-ci est basée sur la méthode d'élimination de Gauss.

On a donc nos trois équations qui dépendent de x_1, x_2 et x_5 . Afin de simplifier le problème, nous décrirons les dérivées partielles comme suit :

$$D_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial x_j} \quad i = 3, 4, 6, 7, 8, 9 \text{ et } j = 1, 2, 5$$

À partir des équations 5.66 à 5.71, on obtient :

$$D_{31} = \frac{C_5}{x_2^{1/2}}$$

$$D_{75} = \frac{1}{2} \frac{C_3}{x_5^{1/2}}$$

$$D_{32} = -\frac{1}{2} \frac{C_5 x_1}{x_2^{3/2}}$$

$$D_{81} = \frac{2C_4^2 x_1}{x_2^2}$$

$$D_{42} = \frac{1}{2} \frac{C_1}{x_2^{1/2}}$$

$$D_{82} = \frac{-2C_4^2 x_1^2}{x_2^3}$$

$$D_{61} = \frac{C_6 x_5^{1/2}}{x_2}$$

$$D_{91} = \frac{C_2 C_4}{x_2}$$

$$D_{62} = -\frac{C_6 x_1 x_5^{1/2}}{x_2^2}$$

$$D_{92} = -\frac{C_2 C_4 x_1}{x_2^2}$$

$$D_{65} = \frac{1}{2} \frac{C_6 x_1}{x_2 x_5^{1/2}}$$

$$A_{11} = \frac{\partial f_1}{\partial x_1} = 1.0222 + 1.0222D_{31} + 1.0222D_{61} + 1.0444D_{81} + 1.0222D_{91}$$

$$A_{12} = \frac{\partial f_1}{\partial x_2} = 1 + 1.0222D_{32} + D_{42} + 1.0222D_{62} + 1.0444D_{82} + 1.0222D_{92}$$

$$A_{13} = \frac{\partial f_1}{\partial x_5} = 1 + 1.0222D_{65} + D_{75}$$

$$A_{21} = \frac{\partial f_2}{\partial x_1} = (2\phi - 2) + (2\phi - 1)D_{31} + 2\phi D_{61} + 4\phi D_{81} + 2\phi D_{91}$$

$$A_{22} = \frac{\partial f_2}{\partial x_2} = -2 + (2\phi - 1)D_{32} - D_{42} + 2\phi D_{62} + 4\phi D_{82} + 2\phi D_{92}$$

$$A_{23} = \frac{\partial f_2}{\partial x_5} = 2\phi D_{65}$$

$$A_{31} = \frac{\partial f_3}{\partial x_1} = 3.7274 + 3.7274D_{31} + 2.7274D_{61} + 7.4548D_{81} + 3.7274D_{91}$$

$$A_{32} = \frac{\partial f_3}{\partial x_2} = 3.7274D_{32} + 2.7274D_{62} + 7.4548D_{82} + 3.7274D_{92}$$

$$A_{33} = \frac{\partial f_3}{\partial x_5} = -2 + 2.7274D_{65} - D_{75}$$

$$B_1 = -f_1 = -(1.0222x_1 + x_2 + 1.0222x_3 + x_4 + x_5 + 1.0222x_6 + x_7 + 1.0444x_8 + 1.0222x_9 - 1)$$

$$B_2 = -f_2 = -((2\phi - 2)x_1 - 2x_2 + (2\phi - 1)x_3 - x_4 + 2\phi x_6 + 4\phi x_8 + 2\phi x_9)$$

$$B_3 = -f_3 = -(3.7274x_1 + 3.7274x_3 - 2x_5 + 2.7274x_6 - x_7 + 7.4548x_8 + 3.7274x_9)$$

APPENDICE F : CALCUL DES DÉRIVÉES PARTIELLES

Pour évaluer c_p , $\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T}\right)_P$ et $\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P}\right)_T$, il est nécessaire de calculer la variation de la fraction molaire par rapport au changement de température. On devra donc dériver les équations 5.49 à 5.51 par rapport à la température ainsi que par rapport à P. Les équations auront donc la forme suivante :

$$\frac{\partial f_j}{\partial \phi} + \frac{\partial f_j}{\partial x_a} \frac{\partial x_a}{\partial \phi} + \frac{\partial f_j}{\partial x_b} \frac{\partial x_b}{\partial \phi} + \frac{\partial f_j}{\partial x_c} \frac{\partial x_c}{\partial \phi} = 0 \quad j = 1, 2, 3$$

Où les termes $\frac{\partial f_j}{\partial x}$ représentent les termes de la matrice [A]. Le terme ϕ représente P ou T. Les termes (a, b, c) sont respectivement pour le mélange pauvre et riche : (1, 5, 8) et (1, 2, 5). Sous forme matricielle, on a

$$\text{donc : } [A] \left[\frac{\partial x}{\partial \phi} \right] + \left[\frac{\partial f}{\partial \phi} \right] = 0$$

Pour le calcul des dérivées partielles selon P et T, il sera nécessaire de calculer les dérivées partielles des constantes C selon P et T. Ces valeurs sont les mêmes pour le mélange riche et pauvre :

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_1}{\partial T} &= \frac{1}{P^{1/2}} \frac{dK_{P1}}{dT}, \frac{\partial C_2}{\partial T} = \frac{1}{P^{1/2}} \frac{dK_{P2}}{dT}, \frac{\partial C_3}{\partial T} = \frac{1}{P^{1/2}} \frac{dK_{P3}}{dT}, \frac{\partial C_4}{\partial T} = \frac{1}{2P^{1/2} K_{P4}^{1/2}} \frac{dK_{P4}}{dT} \\ \frac{\partial C_5}{\partial T} &= \frac{1}{P^{1/2}} \frac{dK_{P5}}{dT}, \frac{\partial C_6}{\partial T} = \frac{1}{P^{1/2}} \frac{dK_{P6}}{dT}, \frac{\partial (C_1 C_4^{1/2})}{\partial T} = \frac{1}{P^{3/4}} \left[\frac{1}{4} \frac{K_{P1}}{K_{P4}^{1/2}} \frac{dK_{P4}}{dT} + K_{P4}^{1/2} \frac{dK_{P1}}{dT} \right] \\ \frac{\partial (C_6 / C_4)}{\partial T} &= \frac{1}{K_{P4}^{1/2}} \frac{dK_{P6}}{dT} - \frac{K_{P6}}{2K_{P4}^{1/2}} \frac{dK_{P4}}{dT}, \frac{\partial (C_5 / C_4^{1/2})}{\partial T} = \frac{1}{P^{1/4}} \left[\frac{1}{K_{P4}^{1/2}} \frac{dK_{P5}}{dT} - \frac{K_{P5}}{4K_{P4}^{1/2}} \frac{dK_{P4}}{dT} \right] \\ \frac{\partial (C_2 C_4)}{\partial T} &= \frac{1}{P} \left[K_{P4}^{1/2} \frac{dK_{P2}}{dT} + \frac{K_{P2}}{2K_{P4}^{1/2}} \frac{dK_{P4}}{dT} \right] \\ \frac{\partial C_1}{\partial P} &= -\frac{C_1}{2P}, \frac{\partial C_2}{\partial P} = -\frac{C_2}{2P}, \frac{\partial C_3}{\partial P} = -\frac{C_3}{2P}, \frac{\partial C_4}{\partial P} = -\frac{C_4}{2P}, \frac{\partial C_5}{\partial P} = -\frac{C_5}{2P}, \frac{\partial C_6}{\partial P} = -\frac{C_6}{2P} \\ \frac{\partial [C_1 C_4^{1/2}]}{\partial P} &= -\frac{3C_1 C_4^{1/2}}{4P}, \frac{\partial [C_6 / C_4]}{\partial P} = 0, \frac{\partial [C_5 / C_4^{1/2}]}{\partial P} = -\frac{C_5}{4C_4^{1/2} P}, \frac{\partial [C_2 C_4]}{\partial P} = -\frac{C_2 C_4}{P} \end{aligned}$$

Afin de simplifier les équations qui suivront, les termes qui suivent seront utilisés :

MÉLANGE PAUVRE

$$Y_2 = \frac{x_2}{C_4} = \frac{x_1}{x_8^{1/2}}, Y_3 = \frac{x_3 C_4^{1/2}}{C_5} = x_1^{1/2} x_8^{1/4}, Y_4 = \frac{x_4}{C_1 C_4^{1/2}} = \frac{x_1^{1/2}}{x_8^{1/4}}$$

$$Y_6 = \frac{x_6 C_4}{C_6} = x_5^{1/2} x_8^{1/2}, Y_7 = \frac{x_7}{C_3} = x_5^{1/2}, Y_9 = \frac{x_9}{C_2} = x_8^{1/2}$$

MÉLANGE RICHE

$$Y_3 = \frac{x_3}{C_5} = \frac{x_1}{x_2^{1/2}}, Y_4 = \frac{x_4}{C_1} = x_2^{1/2}, Y_6 = \frac{x_6}{C_6} = \frac{x_1 x_5^{1/2}}{x_2}$$

$$Y_7 = \frac{x_7}{C_3} = x_5^{1/2}, Y_8 = \frac{x_8}{C_4^2} = \frac{x_1^2}{x_2^2}, Y_9 = \frac{x_9}{C_2 C_4} = \frac{x_1}{x_2}$$

MÉLANGE PAUVRE

Calcul de la variation de la fraction molaire en fonction de la variation de température

$$\frac{df_1}{dT} = \frac{\partial C_4}{\partial T} Y_2 + 1.0222 \frac{\partial \left(\frac{C_5}{C_4^{1/2}} \right)}{\partial T} Y_3 + \frac{\partial (C_1 C_4^{1/2})}{\partial T} Y_4 + 1.0222 \frac{\partial \left(\frac{C_6}{C_4} \right)}{\partial T} Y_6 + \frac{\partial C_3}{\partial T} Y_7 + 1.0222 \frac{\partial C_2}{\partial T} Y_9$$

$$\frac{df_2}{dT} = -2 \frac{\partial C_4}{\partial T} Y_2 + (2\phi - 1) \frac{\partial \left(\frac{C_5}{C_4^{1/2}} \right)}{\partial T} Y_3 - \frac{\partial (C_1 C_4^{1/2})}{\partial T} Y_4 + 2\phi \frac{\partial \left(\frac{C_6}{C_4} \right)}{\partial T} Y_6 + 2\phi \frac{\partial C_2}{\partial T} Y_9$$

$$\frac{df_3}{dT} = 3.7274 \frac{\partial \left(\frac{C_5}{C_4^{1/2}} \right)}{\partial T} Y_3 + 2.7274 \frac{\partial \left(\frac{C_6}{C_4} \right)}{\partial T} Y_6 - \frac{\partial C_3}{\partial T} Y_7 + 3.7274 \frac{\partial C_2}{\partial T} Y_9$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial T} = D_{21} \frac{\partial x_1}{\partial T} + D_{28} \frac{\partial x_8}{\partial T} + Y_2 \frac{\partial C_4}{\partial T}$$

$$\frac{\partial x_3}{\partial T} = D_{31} \frac{\partial x_1}{\partial T} + D_{38} \frac{\partial x_8}{\partial T} + Y_3 \frac{\partial \left(\frac{C_5}{C_4^{1/2}} \right)}{\partial T}$$

$$\frac{\partial x_4}{\partial T} = D_{41} \frac{\partial x_1}{\partial T} + D_{48} \frac{\partial x_8}{\partial T} + Y_4 \frac{\partial (C_1 C_4^{1/2})}{\partial T}$$

$$\frac{\partial x_6}{\partial T} = D_{65} \frac{\partial x_5}{\partial T} + D_{68} \frac{\partial x_8}{\partial T} + Y_6 \frac{\partial \left(\frac{C_6}{C_4} \right)}{\partial T}$$

$$\frac{\partial x_7}{\partial T} = D_{75} \frac{\partial x_5}{\partial T} + x_5^{1/2} \frac{\partial C_3}{\partial T}$$

$$\frac{\partial x_9}{\partial T} = D_{98} \frac{\partial x_8}{\partial T} + x_8^{1/2} \frac{\partial C_2}{\partial T}$$

Calcul de la variation de la fraction molaire en fonction de la variation de la pression

Pour ce calcul, on a qu'à remplacer d/dT par d/dP . En tenant compte que C_6/C_4 ne dépend pas de la pression :

$$\frac{df_1}{dP} = \frac{\partial C_4}{\partial P} Y_2 + 1.0222 \frac{\partial \left(\frac{C_5}{C_4^{1/2}} \right)}{\partial P} Y_3 + \frac{\partial (C_1 C_4^{1/2})}{\partial P} Y_4 + \frac{\partial C_3}{\partial P} Y_7 + 1.0222 \frac{\partial C_2}{\partial P} Y_9,$$

$$\frac{df_2}{dP} = -2 \frac{\partial C_4}{\partial P} Y_2 + (2\phi - 1) \frac{\partial \left(\frac{C_5}{C_4^{1/2}} \right)}{\partial P} Y_3 - \frac{\partial (C_1 C_4^{1/2})}{\partial P} Y_4 + 2\phi \frac{\partial C_2}{\partial P} Y_9,$$

$$\frac{df_3}{dP} = 3.7274 \frac{\partial \left(\frac{C_5}{C_4^{1/2}} \right)}{\partial P} Y_3 - \frac{\partial C_3}{\partial P} Y_7 + 3.7274 \frac{\partial C_2}{\partial P} Y_9,$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial P} = D_{21} \frac{\partial x_1}{\partial P} + D_{28} \frac{\partial x_8}{\partial P} + Y_2 \frac{\partial C_4}{\partial P}$$

$$\frac{\partial x_3}{\partial P} = D_{31} \frac{\partial x_1}{\partial P} + D_{38} \frac{\partial x_8}{\partial P} + Y_3 \frac{\partial \left(\frac{C_5}{C_4^{1/2}} \right)}{\partial P}$$

$$\frac{\partial x_4}{\partial P} = D_{41} \frac{\partial x_1}{\partial P} + D_{48} \frac{\partial x_8}{\partial P} + Y_4 \frac{\partial (C_1 C_4^{1/2})}{\partial P}$$

$$\frac{\partial x_6}{\partial P} = D_{65} \frac{\partial x_5}{\partial P} + D_{68} \frac{\partial x_8}{\partial P} + Y_6 \frac{\partial \left(\frac{C_6}{C_4} \right)}{\partial P}$$

$$\frac{\partial x_7}{\partial P} = D_{75} \frac{\partial x_5}{\partial P} + Y_7 \frac{\partial C_3}{\partial P}$$

$$\frac{\partial x_9}{\partial P} = D_{98} \frac{\partial x_8}{\partial P} + Y_9 \frac{\partial C_2}{\partial P}$$

MÉLANGE RICHE

Calcul de la variation de la fraction molaire en fonction de la variation de température

$$\frac{df_1}{dT} = 1.0222 \frac{\partial C_5}{\partial T} Y_3 + \frac{\partial C_1}{\partial T} Y_4 + 1.0222 \frac{\partial C_6}{\partial T} Y_6 + \frac{\partial C_3}{\partial T} Y_7 + 2.0444 C_4 \frac{\partial C_4}{\partial T} Y_8 + 1.0222 \frac{\partial (C_2 C_4)}{\partial T} Y_9,$$

$$\frac{df_2}{dT} = (2\phi - 1) \frac{\partial C_5}{\partial T} Y_3 - \frac{\partial C_1}{\partial T} Y_4 + 2\phi \frac{\partial C_6}{\partial T} Y_6 + 8\phi C_4 \frac{\partial C_4}{\partial T} Y_8 + 2\phi \frac{\partial (C_2 C_4)}{\partial T} Y_9,$$

$$\frac{df_3}{dT} = 3.7274 \frac{\partial C_5}{\partial T} Y_3 + 2.7274 \frac{\partial C_6}{\partial T} Y_6 - \frac{\partial C_3}{\partial T} Y_7 + 14.9096 C_4 \frac{\partial C_4}{\partial T} Y_8 + 3.7274 \frac{\partial (C_2 C_4)}{\partial T} Y_9,$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial x_3}{\partial T} &= D_{31} \frac{\partial x_1}{\partial T} + D_{32} \frac{\partial x_2}{\partial T} + Y_3 \frac{\partial C_5}{\partial T} \\
\frac{\partial x_4}{\partial T} &= D_{42} \frac{\partial x_2}{\partial T} + Y_4 \frac{\partial C_1}{\partial T} \\
\frac{\partial x_6}{\partial T} &= D_{61} \frac{\partial x_1}{\partial T} + D_{62} \frac{\partial x_2}{\partial T} + D_{65} \frac{\partial x_5}{\partial T} + Y_6 \frac{\partial C_6}{\partial T} \\
\frac{\partial x_7}{\partial T} &= D_{75} \frac{\partial x_5}{\partial T} + Y_7 \frac{\partial C_3}{\partial T} \\
\frac{\partial x_8}{\partial T} &= D_{81} \frac{\partial x_1}{\partial T} + D_{82} \frac{\partial x_2}{\partial T} + 2C_4 Y_8 \frac{\partial C_4}{\partial T} \\
\frac{\partial x_9}{\partial T} &= D_{91} \frac{\partial x_1}{\partial T} + D_{92} \frac{\partial x_2}{\partial T} + Y_9 \frac{\partial (C_2 C_4)}{\partial T}
\end{aligned}$$

Calcul de la variation de la fraction molaire en fonction de la variation de la pression

$$\begin{aligned}
\frac{df_1}{dP} &= 1.0222 \frac{\partial C_5}{\partial P} Y_3 + \frac{\partial C_1}{\partial P} Y_4 + 1.0222 \frac{\partial C_6}{\partial P} Y_6 + \frac{\partial C_3}{\partial P} Y_7 + 2.0444 C_4 \frac{\partial C_4}{\partial P} Y_8 + 1.0222 \frac{\partial (C_2 C_4)}{\partial P} Y_9 \\
\frac{df_2}{dP} &= (2\phi - 1) \frac{\partial C_5}{\partial P} Y_3 - \frac{\partial C_1}{\partial P} Y_4 + 2\phi \frac{\partial C_6}{\partial P} Y_6 + 8\phi C_4 \frac{\partial C_4}{\partial P} Y_8 + 2\phi \frac{\partial (C_2 C_4)}{\partial P} Y_9 \\
\frac{df_3}{dP} &= 3.7274 \frac{\partial C_5}{\partial P} Y_3 + 2.7274 \frac{\partial C_6}{\partial P} Y_6 - \frac{\partial C_3}{\partial P} Y_7 + 14.9096 \frac{\partial C_4}{\partial P} Y_8 + 3.7274 \frac{\partial (C_2 C_4)}{\partial P} Y_9
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial x_3}{\partial P} &= D_{31} \frac{\partial x_1}{\partial P} + D_{32} \frac{\partial x_2}{\partial P} + Y_3 \frac{\partial C_5}{\partial P} \\
\frac{\partial x_4}{\partial P} &= D_{42} \frac{\partial x_2}{\partial P} + Y_4 \frac{\partial C_1}{\partial P} \\
\frac{\partial x_6}{\partial P} &= D_{61} \frac{\partial x_1}{\partial P} + D_{62} \frac{\partial x_2}{\partial P} + D_{65} \frac{\partial x_5}{\partial P} + Y_6 \frac{\partial C_6}{\partial P} \\
\frac{\partial x_7}{\partial P} &= D_{75} \frac{\partial x_5}{\partial P} + Y_7 \frac{\partial C_3}{\partial P} \\
\frac{\partial x_8}{\partial P} &= D_{81} \frac{\partial x_1}{\partial P} + D_{82} \frac{\partial x_2}{\partial P} + 2C_4 Y_8 \frac{\partial C_4}{\partial P} \\
\frac{\partial x_9}{\partial P} &= D_{91} \frac{\partial x_1}{\partial P} + D_{92} \frac{\partial x_2}{\partial P} + Y_9 \frac{\partial (C_2 C_4)}{\partial P}
\end{aligned}$$

Calcul de R, H, U ET Cp

$$\begin{aligned}
\frac{\partial M}{\partial T} &= \sum \frac{\partial x_i}{\partial T} M_i & \frac{\partial M}{\partial P} &= \sum \frac{\partial x_i}{\partial P} M_i \\
\frac{\partial R}{\partial T} &= \frac{-R_0}{M^2} \frac{\partial M}{\partial T} = \frac{-R}{M} \frac{\partial M}{\partial T} & \frac{\partial R}{\partial P} &= \frac{-R_0}{M^2} \frac{\partial M}{\partial P} = \frac{-R}{M} \frac{\partial M}{\partial P} \\
\frac{\partial h}{\partial T} &= \frac{1}{M} \left[\sum \left(x_i \frac{\partial h_i}{\partial T} + \frac{\partial x_i}{\partial T} h_i \right) - \frac{\partial M}{\partial T} h \right] & \frac{\partial h}{\partial P} &= \frac{1}{M} \left[\sum \frac{\partial x_i}{\partial P} h_i - \frac{\partial M}{\partial P} h \right] \\
\frac{\partial u}{\partial T} &= \frac{\partial h}{\partial T} - R - \frac{\partial R}{\partial T} T & \frac{\partial u}{\partial P} &= \frac{\partial h}{\partial P} - \frac{\partial R}{\partial P} T
\end{aligned}$$

Notons que $dh_i/dT = C_{pi}$ et on sait que : $\frac{c_p}{R} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4$

On obtient donc
$$Cp = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{M} \left[\sum_{i=1}^{10} \left(x_i c_{pi} + h_i \frac{\partial x_i}{\partial T} \right) - \frac{hM_T}{M} \right]$$

Avec
$$\frac{h}{R} = a_1T + \frac{a_2}{2}T^2 + \frac{a_3}{3}T^3 + \frac{a_4}{4}T^4 + \frac{a_5}{5}T^5 + a_6$$

$$\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p = 1 - \left(-\frac{TM_T}{M} \right)$$

$$\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \right)_T = -1 - \frac{PM_P}{M}$$

APPENDICE G : CALCUL DES NOx

Avant d'expliquer les détails du calcul de la formation des NOx, il faut d'abord introduire les concepts concernant les réactions dont l'hypothèse d'équilibre ne peut pas être utilisée.

Dans la progression d'une réaction chimique, plusieurs espèces intermédiaires sont formées avant l'atteinte de l'équilibre. Durant la réaction, les produits peuvent réagir dans le sens opposé et former des réactifs. Les réactions directe et inverse se produisent donc simultanément. À l'équilibre, la vitesse de la réaction directe est égale à la vitesse de la réaction inverse. Il n'y a donc aucun changement spontané dans la composition du mélange. Dans une réaction qui n'est pas à l'équilibre, les vitesses de réaction directe et inverse ne sont pas égales. La génération ou destruction de chaque espèce dépend des constantes de formation de la réaction.

Considérons la réaction suivante : $A + B \xrightleftharpoons[k_b]{k_f} C + D$

Où k_f et k_b sont respectivement les constantes de formation directes (forward) et inverses (backward). Ces constantes sont souvent exprimées sous la forme d'Arrhénius :

$$k = A \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \quad \text{ou} \quad k = AT^\beta \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right)$$

A : facteur préexponentiel

E_A : énergie d'activation

Le terme exponentiel (facteur de Boltzmann) établit la fraction de toutes les collisions qui ont une énergie supérieure à l'énergie d'activation [21]. Pour un mélange de gaz où plusieurs réactions occurrent en même temps, cette équation prend la forme suivante.

$$\sum_{j=1}^N v_{ji} X_j \xrightleftharpoons[k_b]{k_f} \sum_{j=1}^N v_{ji} X_j \quad (i = 1, 2, \dots, L)$$

Ici, X_j représente l'espèce j , v_{ji} est le coefficient de stœchiométrie, i représente le numéro de la réaction, j représente l'espèce dont le nombre total est N et L est le nombre total de réactions. Puisque les réactions élémentaires contiennent souvent trois ou quatre espèces seulement, les valeurs de v_{ji} sont souvent nulles (voir exemple plus bas). Le taux net de formation ou destruction d'une espèce est donné par la loi de l'action des masses. Cette loi stipule que la vitesse de réaction d'une réaction élémentaire est proportionnelle au produit des concentrations molaire élevé à la puissance égale au coefficient

stoechiométrique. On obtient donc la relation suivante pour la variation de X_j dans la réaction i . Notons ici que $[X]$ représente une concentration molaire (mole/volume).

$$\frac{d[X_j]_i}{dt} = \Delta v_{ji} \left[k_{fi} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v'_{ji}} - k_{bi} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v''_{ji}} \right]$$

$$\Delta v_{ji} = (v''_{ji} - v'_{ji})$$

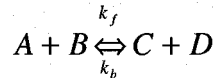
On remarque que Δv_{ji} sera négatif lorsque X_j est détruit dans la réaction directe et positif lorsqu'il est produit dans la réaction directe. Pour ce qui est du taux de variation total :

$$\frac{d[X_j]}{dt} = \sum_{i=1}^L \Delta v_{ji} \left[k_{fi} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v'_{ji}} - k_{bi} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v''_{ji}} \right] = \sum_{i=1}^L \Delta v_{ji} q_i$$

Relation entre les constantes de réaction et K_p

Maintenant, il serait intéressant de connaître la relation qui unit les coefficients de réaction basée sur les concentrations molaires à la constante d'équilibre de chaque réaction qui est basée sur la fraction molaire.

Reprenons notre réaction de base :



Pour l'espèce A, on peut écrire : $\frac{d[A]}{dt} = -k_f [A] [B] + k_b [C] [D]$

Ici, on sous entend que les coefficients stoechiométriques sont égale à 1. À l'équilibre, $A+B=C+D$, la variation de A doit donc être nulle, tout comme B, C et D. On peut donc représenter l'équilibre comme suit :

$$0 = -k_f [A] [B] + k_b [C] [D] \quad \text{ou} \quad \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} = \frac{\prod_{j=1}^N [X_j]^{v'_{ji}}}{\prod_{j=1}^N [X_j]^{v''_{ji}}} = \frac{k_f(T)}{k_b(T)} = K_c$$

On peut aussi exprimer K_c de la façon suivante : $K_c = \prod_{j=1}^N [X_j]^{v_j}$. Cependant, cette équation implique

que le coefficient stoechiométrique est négatif pour les réactifs et positif pour les produits. K_c est la constante d'équilibre basé sur les concentrations. On connaît déjà la définition de la constante K_p [24] :

$$K_p = \prod_{j=1}^N (p_j)^{v_j} = \prod_{j=1}^N (x_j P)^{v_j} = P^{\sum v_j} \prod_{j=1}^N (x_j)^{v_j}$$

où p_j est la pression partielle de l'espèce j , P est la pression totale et x_j est la fraction molaire de l'espèce j .

On a donc :

$$\frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} = K_C \text{ et } K_P = \left(\frac{x_c^{v_c} x_d^{v_d}}{x_a^{v_a} x_b^{v_b}} \right) P^{v_c + v_d - v_a - v_b}$$

La relation entre la concentration molaire et la fraction molaire est la suivante :

$$[X_j] = x_j M \dots M = \frac{P}{RT}$$

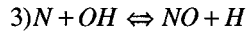
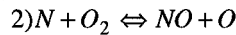
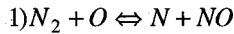
On peut donc exprimer K_C en fonction de K_P .

$$K_C = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} = \frac{\left[\frac{x_c P}{RT} \right]^{v_c} \left[\frac{x_d P}{RT} \right]^{v_d}}{\left[\frac{x_a P}{RT} \right]^{v_a} \left[\frac{x_b P}{RT} \right]^{v_b}} = P^{\sum v_j} \prod_{j=1}^N (x_j)^{v_j} \left(\frac{1}{RT} \right)^{\sum v_j} = K_P \left(\frac{1}{RT} \right)^{\sum v_j}$$

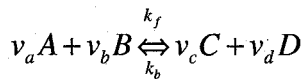
On a donc : $K_P = K_C (RT)^{\sum v_j}$. Notons que $K_P = K_C$ lorsque $\sum v_j = 0$.

Formation des NOx

Il est maintenant reconnu que le mécanisme de formation des oxydes d'azotes (NO, NO₂ et N₂O) dans un moteur à combustion interne n'en n'est pas un d'équilibre. Dans cette étude, le modèle utilisé est basé sur la théorie développée par Lavoie et al [43]. Dans ce modèle, on ne considère que les gaz brûlés derrière la flamme. On assume aussi que la vitesse de dégagement de chaleur produite par une flamme est suffisamment rapide pour supposer que les gaz brûlés sont près de l'équilibre. Pour le calcul de la concentration molaire de NO, on doit assumer un équilibre entre toutes les espèces sauf NO. Les équations qui gouvernent la formation des NO sont nombreuses. Dans le cas d'un carburant ne contenant pas d'azote, les oxydes nitriques sont formés par trois principaux mécanismes qui utilisent l'azote de l'air. Le principal mécanisme est celui de Zeldovich, on l'appelle aussi mécanisme thermique. Il est formé dans les gaz brûlés et résulte de l'oxydation de l'azote contenu dans l'air. Voici donc les 3 réactions qui seront utilisées dans la modélisation. Les deux premières constituent le mécanisme de Zeldovich qui est étendue par la troisième réaction.



Avant d'aller plus loin, voyons une façon de simplifier une équation en fonction des concentrations d'équilibre.



$$\frac{d[C]}{dt} = [k_f [A]^{v_a} [B]^{v_b} - k_b [C]^{v_c} [D]^{v_d}]$$

$$\frac{[A]}{[A]_e} = \alpha \quad \frac{[B]}{[B]_e} = \beta \quad \frac{[C]}{[C]_e} = \gamma \quad \frac{[D]}{[D]_e} = \delta$$

L'indice e représente les concentrations d'équilibres.

$$\frac{d[C]}{dt} = k_f \alpha^{v_a} \beta^{v_b} [A]_e^{v_a} [B]_e^{v_b} - k_b \gamma^{v_c} \delta^{v_d} [C]_e^{v_c} [D]_e^{v_d}$$

$$k_f [A]_e^{v_a} [B]_e^{v_b} = k_b [C]_e^{v_c} [D]_e^{v_d} = R_j$$

$$\frac{d[C]}{dt} = R_j [\alpha^{v_a} \beta^{v_b} - \gamma^{v_c} \delta^{v_d}]$$

Puisque l'on a trois différentes équations, on utilisera k_i^+, k_i^- pour représenter la constante de réaction directe et inverse respectivement.

On peut donc exprimer :

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_1^+ [O][N_2] + k_2^+ [N][O_2] + k_3^+ [N][OH] - k_1^- [NO][N] - k_2^- [NO][O] - k_3^- [NO][H]$$

La variation du nombre de moles de N est :

$$\frac{d[N]}{dt} = k_1^+ [O][N_2] - k_2^+ [N][O_2] - k_3^+ [N][OH] - k_1^- [NO][N] - k_2^- [NO][O] + k_3^- [NO][H]$$

Puisque la concentration de N est beaucoup plus faible que les autres, on peut considérer que sa dérivé par rapport au temps est nulle. On peut donc utiliser la seconde équation pour éliminer [N] dans la première. Celle-ci devient donc :

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_1^+ [O][N_2] \frac{1 - [NO]^2 / (K[O_2][N_2])}{1 + k_1^- [NO] / (k_2^+ [O_2] + k_3^+ [OH])}$$

$$\text{Où : } K = (k_1^+ / k_1^-) (k_2^+ / k_2^-)$$

Puisque l'on assume que toutes les espèces sont à l'équilibre sauf les NOx, on peut introduire de nouvelles constantes :

$$R1 = k_1^+ [O]_e [N_2]_e = k_1^- [NO]_e [N]_e$$

$$R2 = k_2^+ [N]_e [O_2]_e = k_2^- [NO]_e [O]_e$$

$$R3 = k_3^+ [N]_e [OH]_e = k_3^- [NO]_e [H]_e$$

On peut maintenant réarranger l'équation de NO comme suit :

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{2R1 \{1 - ([NO]/[NO]_e)^2\}}{1 + ([NO]/[NO]_e) R1 / (R2 + R3)}$$